

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
Отделение химии и наук о материалах
Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
химический факультет

3-я Всероссийская конференция
"Молекулярное моделирование"

15-17 апреля 2003 г.

Москва, 2003 г.

ОРГКОМИТЕТ

3-й Всероссийской конференции

"МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ"

Сопредседатели Оргкомитета:

Член-корр. РАН Грибов Л.А.

Академик Зефилов Н.С.

Члены Оргкомитета:

Академик РАМН Арчаков А.И.

Проф. Баранов В.И.

Проф. Бачурин С.О.

Проф. Дементьев В.А.

Проф. Кузнецов П.Е.

Проф. Папулов Ю.Г.

Проф. Проскурлина М.В.

Проф. Эляшберг М.Е.

К.х.н. Палюлин В.А.

Ученый секретарь:

К.ф.-м.н. Жогина В.В.

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ *

15 апреля

Утреннее заседание

10.00 Открытие конференции

10.10 Зефилов Н.С.

Современные аспекты QSAR

11.10 Грибов Л.А.

Молекулы как информационные приемно-преобразующие системы

12.10 Баранов В.И.

*Моделирование межизомерных структурных преобразований молекул.
Вероятности переходов и их температурные зависимости*

12.30 Кузьмин В.Е., Артеменко А.Г., Челомбитько В.А., Ляховский А.В.,
Желтвай А.И., Полищук П.Г.

*Иерархическая система моделей QSAR (1D-4D) на базе симплексного
представления молекулярной структуры*

12.50-14.00 Перерыв

Вечернее заседание

14.00 Беленикин М.С., Палюлин В.А., Зефилов Н.С.

*Молекулярное моделирование лиганд-рецепторных комплексов
метаботропных глутаматных рецепторов*

14.20 Дементьев В.А.

*Опыт молекулярного моделирования с использованием суперкомпьютера
MBC-1000*

14.40 Егоров В.В.

Электродинамика протяженных многофононных переходов

15.00 Комиссаров Г.Г.

Моделирование фотосинтеза

15.20 Молчанова М.С., Трач С.С., Зефилов Н.С.

*Направленный поиск новых типов органических реакций с помощью
программы ARGENT-1: первые результаты*

15.40 Ефремов Р.Г.

*Пептиды и белки в мембранах: анализ структуры, динамики, функции в
вычислительных экспериментах*

16.00-18.00 Стендовая секция (доклады №№ 1-35)

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

16 апреля

Утреннее заседание

- 10.00 Арчаков А.И., Иванов А.С., Дубанов А.В.**
Верификация молекулярного моделирования белков в качестве мишени для действия лекарств
- 11.00 Саркисов О.М.**
Фемтохимия элементарных процессов
- 12.00 Новосадов Б.К., Кочкиков И.В., Тарасов Ю.И.**
Моделирование термически средней плотности распределения межъядерных расстояний многоатомных молекул
- 12.20 Пиотгух-Пелецкий В.Н.**
Новые возможности информационной системы по ИК спектроскопии при решении спектроструктурных задач
- 12.40-14.00 Перерыв**

Вечернее заседание

- 14.00 Поройков В.В.**
Био- и хемоинформатика белков - мишеней новых лекарств
- 14.20 Тарасов Ю.И., Кочкиков И.В., Курамшина Г.М., Новосадов Б.К., Саакян А.С.**
Моделирование совокупности структурных экспериментальных данных на основе параметров потенциальных функций
- 14.40 Долгоносков А.М.**
Неэмпирический расчет адсорбции и предсказание удерживания в газовой хроматографии по строению молекул
- 15.00 Эляшберг М.Е., Блинов К.А., Молодцов С.Г., Мартиросян Э.Р., Вильямс А.**
Установление структуры природных соединений по ограниченным 2М ЯМР данным с помощью системы STRUCTURE ELUCIDATOR (StrucEluc)
- 15.20 Новаков И.А., Павлючко А.И., Орлинсон Б.С., Корольков В.В.**
Применение комплексного квантово-химического и спектроскопического метода для изучения реакционной способности аминов в конденсированном состоянии
- 15.40 Суханов Л.П., Перевалов Д.А.**
Моделирование молекулярных эффектов при β -распаде трития неэмпирическими методами квантовой химии
- 16.00-18.00 Стендовая секция (доклады №№ 36-70)**

17 апреля

Утреннее заседание

10.00 Палюлин В.А., Баскин И.И., Зефирова Н.С.

Молекулярное моделирование и конструирование лекарств

11.00 Захарьев Б.Н., Чабанов В.М.

Послушная квантовая механика: Новый статус теории в подходе обратной задачи

12.00-13.00 Перерыв

13.00-15.00 Стендовая секция (доклады №№ 71-105)

Круглый стол

СТЕНДОВАЯ СЕКЦИЯ

1. **Авакянц Г.С., Комиссаров Г.Г.** Компьютерное моделирование переноса электронных возбуждений в фотосинтетической единице: вклад векторной и броуновской компонент.
2. **Алексеев Е.В.** Применения метода функционала плотности при безэталонном количественном спектральном анализе.
3. **Алифанова Е.Н., Лапина О.Ю., Субботин В.А.** Квантовохимическое исследование механизма образования и разложения анионных σ -аддуктов аренов в газовой фазе и растворе.
4. **Арабей С.М., Станишевский И.В., Соловьев К.Н.** Моделирование реакции фотодеструкции металлопорфиринов в полимерной матрице.
5. **Арефьева О.А., Кузнецов П.Е., Толмачев С.А., Купадзе М.С., Хлебцов Б.Н.** Молекулярная динамика и экспериментальные модели липосахарид бактерий *Azospirillum brasilense* SP245 и полисахарид-полисахаридного взаимодействия.
6. **Бабков Л.М., Ведяева Е.С., Пучковская Г.А.** Проявление конформационной подвижности и специфического межмолекулярного взаимодействия в инфракрасных спектрах триторбутилциклогексанкарбоновой кислоты.
7. **Бабков Л.М., Гнатюк И.И., Пучковская Г.А., Трухачев С.В.** Моделирование ИК спектров, строение и конформационная подвижность 4'-п-алкил-4-цианобифенилов.
8. **Бакурадзе Р.Ш., Ананишвили В.О., Джапаридзе К.Г.** Квантово-химическое моделирование некоторых электропроводящих полимеров.
9. **Беленикин М.С., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Молекулярно-динамические расчеты поведения агонистов и антагонистов в лиганд-рецепторных комплексах аминоконцевых доменов метаботропных глутаматных рецепторов разных групп.
10. **Беленикин М.С., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Молекулярно-динамические расчеты лиганд-рецепторных комплексов ионотропных (AMPA подтип) глутаматных рецепторов.
11. **Беленький Л.И., Суслов И.А., Чувылкин Н.Д.** Влияние стабильности окисленных состояний азота, кислорода, серы и селена на позиционную селективность производных пятичленных гетероциклов с одним гетероатомом в реакциях электрофильного замещения.
12. **Березин К.В., Татаренко О.Д., Нечаев В.В.** Расчет неплоских колебаний молекулы порфина.
13. **Берзигияров П.К., Заец В.А., Гинзбург И.Я., Разумов В.М., Шека Е.Ф.** NANOPACK и NANOVIBR: параллельные коды для полуэмпирических квантово-химических вычислений и расчетов гармонических колебаний больших систем.

14. **Богданова Т.Ф., Макаров Л.И., Пиоттух-Пелецкий В.Н.** Распознавание крупного фрагмента соединения на основе таксономии структур поискового ответа.
15. **Бондаренко Е.А., Иванов Ю.В., Вовна В.И.** Квантово-химические расчеты β -дикетонатных комплексов кобальта (II).
16. **Брусков В.П.** Квантово-химическое моделирование таутомерных превращений флавоно-3-олов.
17. **Бурова Т.Г., Тен Г.Н., Кучерова В.В.** Квантово-механический анализ спектров резонансного комбинационного рассеяния молекул простейших оснований нуклеиновых кислот.
18. **Буряк А.К.** Применение молекулярно-статистических расчетов для моделирования внутримолекулярных превращений адсорбированных молекул.
19. **Васильев П.М., Горлов И.Ф., Юрина О.С.** Прогноз фармакологической активности многокомпонентных смесей органических соединений в информационной технологии "Микрокосм".
20. **Васильев Р.Ф.** Моделирование термолитиза пероксидов и возбуждения хемилюминесценции продуктов полуэмпирическими методами квантовой химии. Локальные минимумы, случайные ошибки, способы их уменьшения.
21. **Виноградова М.Г., Папулов Р.Ю., Михайлова Ю.А., Нилов Д.Ю.** Перечисление изомеров замещения спиропентана.
22. **Гаспилович Е.А., Королькова Н.В., Клименко В.Г., Серов С.А., Нурмухаметов Р.Н.** Влияние спин-орбитальной связи в атомах гетероциклических аналогов флуорена на дипольные моменты перехода $T^1 \rightarrow S_0$.
23. **Гафуров У.** Молекулярная модель ползучести высокоориентированных линейных кристаллических полимеров.
24. **Гришина М.А., Потемкин В.А., Русинов Г.Л., Слепухин П.А.** Теоретическое исследование реакций нуклеофильного замещения солей 1-алкил-2-морфолил-3-хлорпиперазина С-нуклеофилами в присутствии оснований.
25. **Гугава М.Т., Павленишвили И.Я., Джапаридзе К.Г.** Моделирование синтеза спирохроменов на основе некоторых аналогов оснований Фишера.
26. **Гучик И.В., Фролов Ю.Л., Шагун В.А., Трофимов Б.А.** Квантовохимический анализ механизмов образования сверхосновных сред типа "гидроксид щелочного металла-вода-диметилсульфоксид" (МОН-Н₂O-ДМСО), где М=Li, Na, K.
27. **Дмитриев А.В., Барышников В.Г.** О движении ионов в порообразующих белковых молекулах.
28. **Дмитрук А.Ф., Заречная О.М., Опейда И.А.** Природа переходного состояния реакции рекомбинации пероксильных радикалов.

29. **Емелина Т.Б., Щека О.Л.** Использование квантовохимического метода X_α – ДВ для изучения электронного строения и химических свойств платиновых катализаторов.
30. **Желтвай А.И., Кузьмин В.Е., Челомбитько В.А., Алиханиди С.Э., Ляховский А.В.** Стереохимический анализ хиральных ароматических полиэдров.
31. **Житов А.Н., Лебедев М.В., Супрун И.П., Иванов С.Г.** Исследование возможностей генетического алгоритма для решения задачи многокомпонентного анализа газовых смесей по дистанционным ИК спектрам поглощения атмосферы.
32. **Завалий М.В.** Моделирование динамических вибронных спектров сложных молекул с учетом межизомерных переходов.
33. **Зволинский В.П., Годик В.А.** Квантовохимическое моделирование спектрально-люминесцентных и генерационных характеристик молекулы 2,2'-битиенил-1,3,4-оксадиазола в растворителях различной природы.
34. **Иванова А.А., Иванов А.А., Олиференко А.А., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Построение универсальной QSPR-модели для разнородной выборки органических соединений.
35. **Иванов А.А., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Сравнительный анализ структуры аденозиновых рецепторов и механизмов связывания их лигандов.
36. **Иванов А.А., Кочиков И.В., Новосадов Б.К., Рыков А.Н., Степанова А.В., Тарасов Ю.И.** Моделирование интенсивности рассеяния электронов на струе пара молекул с движением большой амплитуды.
37. **Иванов Ю.В., Вовна В.И.** Неэмпирические квантовохимические расчеты спектров фотоионизации дикетонатных комплексов Ni.
38. **Калниньш К.К., Семенов С.Г.** Синглетные S_1 и триплетные T_1 бирадикальные состояния этилена и его производных.
39. **Кацюба С.А., Вандюкова Е.Е.** Квантово-химическое моделирование колебательных спектров как метод исследования структуры молекул.
40. **Киреев А.Ф., Каюков А.П.** Обоснование подхода к теоретическому расчету масс-спектра β, β' -дихлоридэтилсульфида на основе квантово-химического полуэмпирического метода PM-3 и расчетного ИК-спектра.
41. **Королевич М.В., Жбанков Р.Г., Пиоттух-Пелецкий В.Н., Дерендяев Б.Г.** Моделирование ИК спектров углеводов.
42. **Косарев А.В., Мельников Г.В.** Функция распределения молекул спирта в мицеллярных ассоциатах.
43. **Кузнецова Н.Б., Кузнецов П.Е., Согуренко И.А.** Дибензо-пара-диоксины – катализаторы образования перекиси водорода.
44. **Кузнецов П.Е.** Дескрипторы микроокружения в задачах QSAR.

45. Кузьмин В.Е., Огниченко Л.Н., Артеменко А.Г., Ляховский А.В. Прикладные возможности концепции информационного поля молекулы.
46. Кунцевич А.Д., Писковский С.В., Новиков С.С., Матюшин Ю.Н., Селезнев П.А., Вьюнова И.Б. О классификации химических соединений, необходимой при разработке базы данных для внеэкспериментального прогноза зависимости биологической активности от структуры химического соединения.
47. Лагунин А.А. Количественный анализ зависимостей структура-спектр активности-величина эффекта для ингибиторов эндотелин-превращающего фермента с применением самосогласованной регрессии.
48. Лебедев К.С., Строков И.И. Моделирование процессов фрагментации органических молекул под действием ионизирующего излучения.
49. Лобанов А.В., Комиссаров Г.Г., Холуйская С.Н. О роли H_2O_2 в экспериментах, моделирующих абиогенный синтез органических веществ.
50. Мелихов Н.А., Шмелев Р.В., Дмитриев А.В., Барышников В.Г. О распределении молекулярного электростатического потенциала в полости порообразующих белков.
51. Мельников Г.В., Косарев А.В. Моделирование триплет-триплетного переноса энергии электронного возбуждения в водно-мицелярных растворах.
52. Морозова Т.А., Крылов А.В., Белов А.П. Структурная нежесткость η^3 -аллильного комплекса палладия на основе сорбиновой кислоты.
53. Морозов В.А., Дубина Ю.М. Смешанное квантово-классическое моделирование внутримолекулярной динамики при преобразовании света молекулами.
54. Муравьев Г.А. Взаимодействие двух атомов на расстояниях, сравнимых с их размерами.
55. Муратов Е.Н., Кузьмин В.Е., Камалов Г.Л., Котляр С.А., Григоращ Р.Я., Шишкин О.В., Шишкина С.В. Модели для анализа структурного подобия конформаций макроциклов.
56. Муштакова С.П., Варламова Т.М., Герасимова Г.В., Юрина Е.С. Квантово-химическое моделирование строения комплексов щелочных металлов с апротонными растворителями.
57. Новиков С.С., Писковский С.В., Лебедев В.П., Селезнев В.А. Оценка термодинамических и кинетических параметров при расчетном моделировании активных центров ферментов и рецепторов некоторых физиологически активных соединений.
58. Новосадов Б.К. Использование интегрального уравнения для теории возмущений при моделировании ангармонических колебательных спектров молекул.
59. Новосадов Б.К., Кочкиков И.В., Тарасов Ю.И. Моделирование ангармонических силовых констант многоатомных молекул методом масштабирования результатов неэмпирических расчетов.

60. **Осипов А.Ю., Иванов Ю.В., Вовна В.И.** Расчет фотоионизационных спектров фторированных производных ацетилацетоната Cu и Ni.
61. **Павич Т.А., Арабей С.М.** Моделирование фотохимических превращений бисантена и его фенилпроизводных.
62. **Панюшкин В.Т., Сухно И.В., Бузько В.Ю., Ковалева И.А.** Моделирование магнитно-релаксационных свойств и состояния акваиона Ga(3+) в водных растворах электролитов.
63. **Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г., Басалаева П.С.** Комбинаторный анализ в химии.
64. **Погребняк А.В.** MATRIX - новый алгоритм прогнозирования биологического действия органических молекул, основанный на многомерном анализе физико-химических дескрипторов современных лекарственных препаратов.
65. **Потемкин В.А., Гришина М.А., Гуччионе С., Перспикаче С.** Определение ориентации ДНК антиметаболитов в полости реального рецептора в рамках 3D QSAR метода BiS.
66. **Рогачева С.М., Кузнецов П.Е., Злобин В.А., Назаров Г.В., Грачева А.А., Согуренко И.А.** К вопросу о физической природе действия сверхнизких концентраций – эксперимент и теория.
67. **Рыбальченко И.В., Павлючко А.И., Сигейкин Г.И., Киреев А.Ф., Суворкин В.Н.** Квантово-химическое моделирование ИК-спектров фосфорорганических соединений с точностью, необходимой для их спектральной идентификации
68. **Рыжов А.Н., Лapidус А.Л., Словохотова О.Л., Смоленский Е.А., Чуваева И.В., Зефиоров Н.С.** Расчеты топографических индексов Винера для алканов.
69. **Рыжов А.Н., Маслова Л.К., Смоленский Е.А., Лapidус А.Л., Зефиоров Н.С.** Моделирование температур плавления нормальных алканов.
70. **Рябченко О.Б., Слабженников С.Н., Куартон Л.А.** Исследование характеристик связи металл-лиганд в трис-ацетилацетонатных комплексах переходных металлов и металлов III-A группы методами ИК-спектроскопии и квантовой химии.
71. **Садым А.В., Лагунин А.А., Филимонов Д.А., Поройков В.В.** Интернет-ресурс для прогноза спектра биологической активности ХС.
72. **Салтыкова М.Н., Виноградова М.Г., Чернолецкий К.В., Смоляков В.М.** Моделирование свойств замещенных метилсилана в атом-атомном представлении.
73. **Сальников А.Н., Спивак А.В., Мельников Г.В.** Кинетика процессов дезактивации энергии электронного возбуждения молекул пирена, иммобилизованных в полисахаридные матрицы.
74. **Скворцова М.И., Федяев К.С., Палюлин В.А., Зефиоров Н.С.** Базисные топологические дескрипторы и их применение для построения корреляций "структура-свойство".

75. **Скворцова М.И., Федяев К.С., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Обратная задача в проблеме связи "структура-свойство" для случая корреляционных уравнений, содержащих базисные топологические дескрипторы.
76. **Смоленский Е.А., Камерницкий А.В., Маслова Л.К., Зефирова Н.С.** Применение дескрипторного анализа для моделирования влияния минералокортикоидов на Na^+ , K^+ -зависимую АТФ-азу.
77. **Смоленский Е.А., Шпилькин С.А., Чуваева И.В., Чувылкин Н.Д.** Моделирование геометрических корреляционных эффектов ступенчатыми функциями.
78. **Солкан В.Н., Кузьмин И.В.** Исследование методом функционала плотности присоединения трет-бутильного катиона к изобутену, 1-бутену и 2-бутену в среде жидкой HF .
79. **Соловова Н.В., Курбатова С.В.** Компьютерная система прогнозирования "структура-свойство".
80. **Соловьев А.Н., Баранов В.И.** Моделирование возбужденных состояний и вибронных спектров аценов.
81. **Сударушкин С.К.** Моделирование действия аналитических реагентов с полиэлементным детектированием
82. **Сударушкин С.К., Гусакова Н.Н.** Молекулярное моделирование для оценки ароматических альдегидов как органических реагентов на первичные ароматические амины.
83. **Сухно И.В., Бузько В.Ю., Панюшкин В.Т., Арутюнян М.М.** Учет влияния фоновых электролитов на константы устойчивости комплексных соединений при моделировании гидрохимических процессов.
84. **Тен Г.Н., Бурова Т.Г., Баранов В.И.** Моделирование структуры пурина в различных фазовых состояниях.
85. **Тимофеева З.Ю., Егорова А.Ю.** Моделирование реакционной способности 3Н-пиррол-2-онов и 3Н-фуран-2-онов в условиях конденсации Михаэля.
86. **Ткаченко О.Ю., Белов А.П.** Компьютерное моделирование внутрисферных превращений в η^3 -аллильных комплексах палладия с аминами.
87. **Трач С.С., Молчанова М.С., Зефирова Н.С.** Реализация дискретной контрамоции в алгоритмах генерации органических структур и реакций.
88. **Трач С.С., Молчанова М.С., Зефирова Н.С.** О регулярности вырожденных процессов: классификация вырождения и ее применение для целей систематического поиска новых типов органических реакций.
89. **Тупицын Е.Н., Березин К.В., Березин В.И.** Квантовые модели и спектральные свойства монозамещенных бензола.
90. **Туровский Н.А., Опейда И.А., Николаевский А.Н., Антоновский В.Л.** Супрамолекулярная модель реакции каталитического распада органических пероксидов, активированного ониевыми солями.

91. **Филимонов Д.А.** Компьютерная оценка свойств химических соединений с использованием неполной эмпирической информации.
92. **Фоменко А.Е., Соболев Б.А., Филимонов Д.А., Поройков В.В.** Применение структурных MNA-дескрипторов для поиска сходства аминокислотных последовательностей белков.
93. **Фролов Ю.Л., Гучик И.В.** Квантовохимическое исследование внутримолекулярного вращения метилтиогруппы в молекуле тиоанизола.
94. **Фурер В.Л., Коваленко В.И., Борисоглебская Е.И.** Расчет интенсивностей полос в ИК спектрах и конформационный анализ каликс[4]аренов.
95. **Хромов А.И., Артеменко А.Г., Кузьмин В.Е.** Специализированная СУБД для решения задач 1D-4D QSAR/QSRP.
96. **Чистяков А.Л., Станкевич И.В.** О проблеме стабилизации η^5 -связей в комплексах фуллерена C_{60} с атомами переходных металлов. Моделирование методом DFT-РВЕ структуры и электронного строения комплексов $12\eta^5 - \pi - MC_5H_5C_{60}$ (M=Fe, Ru, Os).
97. **Чистяков А.Л., Станкевич И.В., Гамбарян Н.П., Ахрем И.С.** Изучение активации метана и пропана методом DFT.
98. **Шамсиев Р.С., Белов А.П.** Квантово-химическое моделирование путей образования пи-комплексов этилена с тетрахлооропалладатом (2-).
99. **Шамсиев Р.С., Белов А.П.** Взаимодействие аллилхлорида с тетракарбонилами никеля и палладия (квантово-химическое моделирование).
100. **Шека Е.Ф.** Являются ли фуллерены полирадикалами?
101. **Шека Е.Ф., Заец В.А., Каманина Н.В.** О виртуальном и реальном переносе заряда в межмолекулярных комплексах на основе фуллеренов.
102. **Элькин М.Д., Ведяева С.Ю., Элькин П.М.** Теоретическое исследование колебательных спектров и электронной структуры полихлорированных дибензо-п-диоксинов.
103. **Элькин М.Д., Ведяева С.Ю., Успенский К.Е.** Моделирование колебательных спектров β -хлорвинилдихлорарсина (люизита).
104. **Юхневич Г.В., Тараканова Е.Г., Цой О.Ю.** Перенос протона в системе ДМФА-HCl кислота по данным ab initio расчетов.
105. **Яковенко О.Я., Голуб А.Г., Бджола В.Г., Ярмолюк С.М.** Интеграция молекулярной динамики и докинга для предсказания биологической активности химических соединений.