

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Отделение наук о Земле

Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,

химический факультет

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

12-15 апреля 2005 г.

Москва, 2005 г.

ОРГКОМИТЕТ

4-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 *

12 апреля

Утреннее заседание

10.00 Открытие конференции

10.10 Зефирова Н.С. (пленарный доклад)

Химия и математика

11.10 Воеводин В.В. (пленарный доклад)

Параллельные вычисления

12.10 Богданова Т.Ф., Пиоттух-Пелецкий В.Н., Молодцов С.Г., Макаров Л.И.

Установление строения органических соединений на основе быстрой таксономии структур поискового ответа

12.30 Наумов А.В.

Моделирование спектров одиночных молекул в стеклах при низких температурах

12.50-14.00 Перерыв

Вечернее заседание

14.00 Буряк А.К., Ульянов А.В.

Оценка параметров межмолекулярных взаимодействий из адсорбционных данных

14.20 Васильев Р.Ф., Цаплев Ю.Б.

Квантово-химическое (PM3) моделирование фотопревращений и хемивозбуждения в фотоиндуцированной хемилюминесценции гидразонов салицилового альдегида

14.40 Воеводин Вл.В.

Суперкомпьютерные технологии решения больших задач в распределенных вычислительных средах

15.00 Гордиенко Т.В.

Характеристика колебательного процесса в модели взаимодействия двух фотосистем высших растений как информационные параметры устойчивости системы к внешнему воздействию

15.20 Дзябченко А.В.

Ab initio предсказание органических кристаллических структур

15.40-18.00 Стендовая секция (доклады №№ 1-32)

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

13 апреля

Утреннее заседание

- 10.00 Баранов В.И. (пленарный доклад)**
Процессы структурной изомеризации, передача сигналов в молекулах и компьютерные эксперименты
- 11.00 Дементьев В.А. (пленарный доклад)**
Использование клеточных автоматов в моделировании процессов химического упорядочивания
- 12.00 Морозов В.А., Дубина Ю.М., Доронкин Д.Е., Шорыгин П.П.**
Бифуркации в эволюции структуры молекулы при фотоизомеризации
- 12.20 Иванов А.С., Скворцов В.С., Сеченых А.А., Смолинская Ю.Ю., Арчаков А.И.**
Проблемы и перспективы моделирования трехмерных структур цитохромов P450
- 12.40-14.00 Перерыв**

Вечернее заседание

- 14.00 Кацюба С.А., Вандюкова Е.Е.**
Интерпретация и предсказание колебательных спектров сложных систем на основе комбинации принципов неэмпирических расчетов и структурно-группового анализа
- 14.20 Комиссаров Г.Г., Авакянц Г.С.**
Компьютерное моделирование интуитивного поиска решения исследовательской задачи
- 14.40 Корнилов М.Ю., Михайленко А.В., Любчук Т.В., Руденко И.В., Реутов Д.В., Плахотник В.В., Исаев С.Д.**
Кодирование, конструирование и распознавание углеродных нанотрубок, нанокольца и наноспиралей
- 15.00 Кузьмин В.Е.**
Разноразмерная (1D - 3D) стереохимия
- 15.20 Шишков А.В., Богачева Е.Н., Долгов А.А., Чуличков А.Л.**
Третьевая планиграфия - новый полуэмпирический метод моделирования пространственной структуры белков
- 15.40-18.00 Стендовая секция (доклады №№ 33-64)**

14 апреля

Утреннее заседание

- 10.00 Трач С.С., Зефирова Н.С. (пленарный доклад)**
Методы перечисления производных органических структур: общие формулы, позволяющие учитывать хиральность и допустимость заместителей
- 11.00 Немухин А.В., Григоренко Б.Л., Боченкова А.В., Рогов А.В., Епифановский Е.М. (пленарный доклад)**
Молекулярное моделирование в химии больших молекул
- 12.00 Мясоедов Б.Ф., Павлючко А.И., Рыбальченко И.В., Сигейкин Г.И., Киреев А.Ф., Суворкин В.И.**
Фрагментарные методы расчета ИК-спектров фосфоорганических соединений с точностью, необходимой для их спектральной идентификации
- 12.20 Долгоносков А.М.**
Применение теории ван-дер-ваальсовых сил, основанной на модели многокомпонентного электронного газа, для предсказания хроматографического удерживания по строению молекул
- 12.40-14.00 Перерыв**

Вечернее заседание

- 14.00 Прудковский А.Г., Долгоносков А.М.**
Характеристика формы молекулы в адсорбции
- 14.20 Смоленский Е.А., Чувылкин Н.Д., Словохотова О.Л., Платунов Д.Ю.**
Метод локальной аппроксимации в задачах «структура-свойство»
- 14.40 Рыжов А.Н., Смоленский Е.А., Лapidус А.Л., Зефирова Н.С.**
Моделирование физико-химических свойств алканов
- 15.00 Рыжов А.Н., Маслова Л.К., Смоленский Е.А., Лapidус А.Л., Зефирова Н.С.**
Математическое моделирование каталитических реакций углеводородов с помощью меры доступности С-С связей и атомов углерода
- 15.20 Смоленский Е.А., Чуваева И.В., Власова Г.В.**
Матрица химических структур и формализация проблемы «структура-свойство»
- 15.40-18.00 Стендовая секция (доклады №№ 65-97)**

15 апреля

Утреннее заседание

- 10.00 Шайтан К.В. (пленарный доклад)**
Молекулярная динамика био- и наноструктур
- 11.00 Грибов Л.А. (пленарный доклад)**
Модели, математика и понятие точности в квантовой химии
- 12.00 Блинов К.А., Смурный Е.Д., Молодцов С.Г., Эляшберг М.Е.**
Установление структуры, стереохимии и пространственных моделей органических молекул по 2М ЯМР спектрам в системе Structure Elucidator
- 12.20 Молодцов С.Г., Блинов К.А., Эляшберг М.Е.**
Генерация структур в экспертной системе по 2М ЯМР данным, содержащим корреляции нестандартной длины
- 12.40 Товмаш А.В.**
Сравнительное исследование свойств водных растворов поливинилового спирта и полиэтиленгликоля методом молекулярной динамики
- 13.00 Шека Е.Ф.**
Моделирование и прогноз путей химических реакций с участием фуллеренов
- 13.20 Суханов Л.П., Перевалов Д.А.**
Теоретическое исследование электронных возбуждений при β -распаде твёрдого трития
- 13.40 Круглый стол**

СТЕНДОВАЯ СЕКЦИЯ

1. **Алиева И.Н., Мустафаева Н.Н., Годжаев Н.М.** Конформационные состояния фрагмента 1-60 n-концевого регуляторного домена тирозингидроксилазы
2. **Ананишвили В.О., Бакурадзе Р.Ш., Салуквадзе Н., Джапаридзе К.Г.** Моделирование электропроводящих полимерных систем (II)
3. **Арефьева О.А., Толмачев С.А., Купадзе М.С., Шульгин С.В., Кузнецов П.Е.** Компьютерное моделирование структуры и динамики полисахарида внешней мембраны *Azospirillum brasilense Sp 245* и полисахарид-полисахаридного взаимодействия
4. **Артеменко А.Г., Кузьмин В.Е., Бондаров Д.В., Макан С.Ю., Павловский В.И., Андронати С.А.** QSAR анализ взаимодействия 1,4-бенздиазепин-2-онов с бенздиазепиновыми рецепторами
5. **Бабков Л.М., Баран Я., Безродная Т.В., Давыдова Н.А., Пучковская Г.А., Трухачев С.В., Успенский К.Е., Шимановская В.В.** Моделирование структуры и колебательных спектров бензофенона и продуктов его фотохимических превращений
6. **Бабков Л.М., Баран Я., Давыдова Н.А., Петрашко А., Трухачев С.В., Успенский К.Е.** Моделирование, колебательные спектры, особенности структуры и свойства 2-бифенилметанола
7. **Бабков Л.М., Гнатюк И.И., Пучковская Г.А., Трухачев С.В.** Исследование некоторых особенностей строения и фазовых переходов в 4-n-алкил-4'-цианобифенилах на основе моделирования их спектров ИК поглощения
8. **Батаев В.А., Годунов И.А.** Квантовохимическое моделирование электронного и пространственного строения молекул акролеина и его монометилзамещенных производных в основном и возбужденных электронных состояниях
9. **Белоголов М.А., Белоголова Е.Ф., Сидоркин В.Ф., Пестунович В.А.** Теоретическое изучение гиперчувствительности экранирования ядер ^{29}Si и ^{17}O (O-Si)хелатных и цвиттерионных комплексов кремния к эффекту среды
10. **Бокарев С.И., Долгов Е.К., Батаев В.А., Годунов И.А.** Неэмпирические модели инверсионного движения молекул X_2CO и XYCO (X,Y=H,F,Cl) в возбужденном триплетном электронном состоянии
11. **Будыка М.Ф.** Моделирование фотохимической активности ароматических азидов
12. **Бузько В.Ю., Сухно И.В., Ковалева И.А., Рамазанова Д.Н.** Моделирование устойчивости и строения кластеров 1,4-диоксан - вода на основании полуэмпирических расчетов
13. **Бурова Т.Г., Тен Г.Н.** Квантово-механический анализ спектров резонансного комбинационного рассеяния тиозамещенных урацила
14. **Васильева И.А., Киселева Н.А., Наумова Н.Л., Наумов А.В.** Метод моделирования вибронной структуры недостаточно разрешенных спектров Шпольского и его применение

15. **Васильев П.М., Спасов А.А., Косолапов В.А., Степанов А.В., Черников М.В.** Использование информационной технологии «Микрокосм» для прогноза фармакологической активности солей органических соединений
16. **Веденева Ю.А., Лобанов А.В., Холуйская С.Н., Комиссаров Г.Г.** Образование пероксида водорода в модельных фотосинтезирующих системах
17. **Виноградова М.Г., Папулова Д.Р.** Моделирование энергий разрыва связей в замещенных этана и его аналогах в атом-атомном представлении
18. **Высоцкий Ю.Б., Болдырева Ф.Л., Брянцев В.С.** Конформационный анализ мономеров и димеров фторалканолов в рамках квантово-химического полуэмпирического метода PM3
19. **Высоцкий Ю.Б., Болдырева Ф.Л., Муратов Д.В.** Конформационный анализ мономеров и димеров нормальных алифатических кислот $C_nH_{2n+1}COOH$ ($n = 5-20$) в методе PM3
20. **Гамбарян Н.П., Чистяков А.Л., Станкевич И.В., Ахрем И.С.** Изучение методом DFT-B3LYP активации метана и пропана электрофилами с бромцентрированными катионными центрами
21. **Гаспилович Е.А., Королькова Н.В., Клименко В.Г., Серов С.А.** Влияние гетероатома и симметрии триплетного электронного $\pi\pi^*$ -состояния плоских молекул на величину и поляризацию дипольного момента чисто электронного перехода $T \rightarrow S_0$
22. **Глушко А.А., Погребняк А.В.** Метод прогнозирования биологической активности для малых, конформационно лабильных органических молекул
23. **Годунов И.А., Яковлев Н.Н., Абраменков А.В., Лурье С.Л.** Анализ колебательной структуры 3418\AA -электронного спектра поглощения пропанала CH_3CH_2CHO и CH_3CH_2CDO
24. **Горкуненко О.А., Капкан Л.М., Вдовиченко А.Н., Червинский А.Ю.** Применение спектроскопии ЯМР 1H , ^{13}C и анализа констант экранирования для определения строения продукта реакции эндо-дициклопентадиена и дихлоркарбена
25. **Грибанова Т.Н., Гапуренко О.А., Миняев Р.М., Минкин В.И.** Квантово-химическое моделирование систем с гиперкоординированным углеродным центром
26. **Грибанова Т.Н.** Квантово-химическое моделирование действия хемосенсорных систем на основе N_1, N_2 -ди(9-антрилметил)-1,2-этандиамина
27. **Гугава М.Т., Павленишвили И.Я., Джапаридзе К.Г.** Моделирование процесса раскрытия циклической формы спирохромена (1)
28. **Гусакова Н.Н.** Молекулярное моделирование – важное звено в изучении темы «химическая связь»
29. **Гусакова Н.Н., Сударушкин С.К.** Прогноз реакционной способности замещенных анилина в реакциях конденсации
30. **Демухамедова С.Д.** Изучение связи электронной и пространственной структуры некоторых пестицидов карбаматного ряда с их биологической активностью

31. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И. Исследование ИК полос поглощения NO_2 групп в некоторых химических соединениях
32. Дмитриев А.В., Марков И.В., Твердислов В.А. Моделирование третичной структуры функционально эквивалентных изомеров трансмембранных белков
33. Дмитрук А.Ф., Зайцева В.В., Тюрина Т.Г., Горбань О.А., Заречная О.М. Роль комплексообразования в формировании структуры макроцепи при сополимеризации малеинового ангидрида со спиро-орто-карбонатами
34. Завалий М.В., Баранов В.И. Сравнение моделей описания фотохимических превращений молекул
35. Иванова Н.М. Неэмпирическое моделирование реакции распада тетроксидов CH_3OONO по механизму Рассела
36. Иванова Н.М., Маркус В.А., Мулдахметов З.М. Неэмпирическое исследование реакции образования формилоксильного радикала HCO_2
37. Иргибаетова И.С., Муханбетова Н. Квантово-химическое моделирование реакции первичных алифатических диаминов с сероуглеродом в присутствии едкого калия
38. Казачинская Е.П., Баскин И.И., Мамонов П.А., Матвеев В.Н. Молекулярное моделирование комплексообразования молекул β -циклодекстрина и менадиона
39. Калач А.В. Применение искусственных нейронных сетей для прогнозирования коэффициентов распределения бензойных кислот между водной и органической фазами
40. Калниньш К.К., Семенов С.Г. Низшие возбужденные состояния олефинов и перфторолефинов в реакциях термической димеризации
41. Королевич М.В., Кириллова С.Г., Жбанков Р.Г. Моделирование ИК спектров и определение конформации пиранозного цикла эпоксисахаридов
42. Королькова Н.В., Клименко В.Г., Серов С.А., Нурмухаметов Р.Н., Гаспилович Е.А. Излучательная дезактивация низшего триплетного $\pi\pi^*$ -электронного состояния в гетероциклических аналогах флуорена
43. Крылов А.Ф. Математическое моделирование на основе общих положений неравновесной термодинамики процессов переноса в парообразующих молекулярных системах
44. Кудич А.В., Батаев В.А., Годунов И.А. Одно- и многомерные модели движений с большой амплитудой в молекуле пропаналя в основном и низших возбужденных синглетном и триплетном электронных состояниях
45. Кузьмин В.Е., Ляховский А.В. Оценка структурного подобия/различия соединений на основе циркулярных моделей молекул
46. Кучуров И.В., Павлючко А.И. Спектроскопическое вычисление энергий диссоциации связей C-H углеводородов ряда этилена

47. **Лазаревич М.И., Сидоркин В.Ф.** Квантовохимическое моделирование процесса комплексообразования трициклических п-донорно-стабилизированных силициениевых и карбениевых катионов с основаниями Льюиса
48. **Лебедев К.С., Строков И.И.** Совместное использование масс- и ИК-спектров при определении молекулярной структуры неизвестного соединения
49. **Маргулис В.А., Мурюмин Е.Е., Томилин О.Б.** Моделирование адсорбции атомов на одностеночных углеродных нанотрубках
50. **Маргулис В.А., Гайдук Е.А., Бояркина О.В., Томилин О.Б., Фомина Л.В.** Теоретическое моделирование влияния боковых групп с собственной системой сопряжения на электронную структуру и оптические свойства макромолекул полидиацетиленов
51. **Михайлов И.В.** Программный комплекс LEV для моделирования молекулярных спектров в версии для Windows
52. **Молчанова М.С., Трач С.С., Зефирев Н.С.** Компьютерный дизайн новых типов органических реакций: использование свободно распространяемой версии программы ARGENT-1
53. **Морозова Т.А., Крылов А.В., Белов А.П.** Квантово-химическое исследование позиционной изомерии и диастереомерии гидроксилсодержащего η^3 -аллильного комплекса палладия на основе сорбиновой кислоты
54. **Муратов Е.Н., Артеменко А.Г., Кузьмин В.Е., Заколюдяжная О.В., Чуприн Г.Н., Литвинова Л.В., Кирияк А.В., Ткачук В.В., Краевская Н.С., Котляр С.А., Камалов Г.Л.** Анализ структурно-функциональных отношений в ряду замещенных краун – эфиров
55. **Наумов А.В., Вайнер Ю.Г.** Модифицированная модель фотонного эха в низкотемпературных стеклах
56. **Нилов Д.Ю., Папулов Р.Ю., Смоляков В.М.** Перечисление и систематизация изомеров замещения бицикло-[m,n,k]-алканов
57. **Новосадов Б.К.** Моделирование спектро-структурных свойств молекул с тяжелыми атомами с помощью нового алгоритма, основанного на базисных элементах в виде функций Бесселя с вещественными индексами
58. **Огниченко Л.Н., Кузьмин В.Е.** Количественные аспекты феномена биоизостеризма
59. **Павлючко А.И., Романенко О.А.** Вычисление вклада обертонов и составных частот в ИК спектры поглощения алканов и нитрилов углеводородов ряда этилена
60. **Папулов Ю.Г., Звягинцев Н.В., Нилов Д.Ю., Скопинцева В.А.** Характеристические полиномы молекулярных графов и схемы расчета
61. **Погребняк А.В.** Методы прогнозирования биологической активности основанные на анализе молекулярных дескрипторов
62. **Пожиленкова Г.В., Потемкин В.А., Сухарев Ю.И.** Теоретическое исследование процессов формирования агрегатов оксигидратов железа (III) с водой

63. **Полищук П.Г., Кузьмин В.Е., Артеменко А.Г., Макан С.Ю., Соболева С.Г., Андронати С.А.** Анализ аффинитета лигандов серотониновых 5-HT_{1A} рецепторов с помощью иерархической системы 1D – 4D QSAR
64. **Семесько Д.Г., Хурсан С.Л.** Переходные состояния реакций радикального отрыва: сравнительный анализ квантово-химических методов и модели пересекающихся парабол Е. Т. Денисова
65. **Сидоркин В.Ф., Лазаревич М.И., Белоголова Е.Ф., Лазарева Н.Ф., Пестунович В.А.** Молекулярный дизайн каркасных структур, содержащих координационную связь P(III)→Si
66. **Скворцова М.И., Палюлин В.А., Зефилов Н.С.** Компьютерный дизайн топологических индексов в органической химии
67. **Скворцова М.И., Палюлин В.А., Зефилов Н.С.** Построение моделей связи «структура-свойство» на основе концепции молекулярного подобия путем оптимального подбора меры подобия и молекулярных дескрипторов
68. **Солкан В.Н.** Моделирование реакции селективного каталитического восстановления окислов азота углеводородами на высококремнистых цеолитах модифицированных ионами кобальта, никеля и меди
69. **Солкан В.Н.** Моделирование реакции региоселективного восстановления нитрогрупп в тринитротолуоле и динитротолуоле под действием катионов титана и железа
70. **Солкан В.Н.** Неэмпирические расчеты поверхности потенциальной энергии для ряда катионов R-N=N=O(+), где R=Me, Me₃C, MeO, Me₂N, Ph
71. **Соловьев А.Н., Баранов В.И.** Развитие параметрического метода моделирования вибронных спектров и возбужденных состояний сложных молекул: модели второго приближения метода
72. **Соловьев М.Е., Соловьев М.М., Туров Б.С.** Динамический конформационный анализ гидропероксидов изопропилбензола и третбутила
73. **Стадник И.Л., Нргалиев Н.У., Никольский С.Н., Масалимов А.С.** Моделирование спектров ЭПР 3,6-дитрет.бутил-2-оксифеноксила в протолитических реакциях
74. **Станкевич И.В., Чистяков А.Л.** Могут ли существовать комплексы фуллеренов с атомами металлов со связями η³-π-типа?
75. **Сухно И.В., Бузько В.Ю., Ковалева И.А., Кашаев Д.В., Корниенко И.В.** Ab initio моделирование кластеров муравьиная кислота - вода, уксусная кислота - вода
76. **Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.** Квантово-химическое исследование гетерокомплексов (HF)_n·ДМФА (n = 4 – 6)
77. **Татаринов С.И., Элькин М.Д.** Моделирование структуры молекул и ик спектров нематогенных 4-4'-замещенных азоксибензолов
78. **Тен Г.Н., Бурова Т.Г., Баранов В.И.** Моделирование структуры гуанина в конденсированных состояниях

79. **Тен Г.Н., Минор А.А., Баранов В.И.** Моделирование вибронных спектров урацила, тимина и цитозина
80. **Тен Г.Н., Минор А.А., Баранов В.И.** Определение таутомерных форм нуклеиновых оснований по вибронным спектрам высоковозбуждённых состояний
81. **Ткаченко О.Ю., Белов А.П.** Теоретическое исследование взаимного влияния лигандов в η^3 -аллильных комплексах палладия
82. **Томилин О.Б., Сыркина Н.П.** Электронная структура изомеров фуллерена C_{60} и индексы Вайберга
83. **Томилин О.Б.; Фомина Л.В.** Моделирование структуры устойчивых "квазиодномерных" кластеров ртути
84. **Трач С.С., Молчанова М.С., Зефирова Н.С.** Методология перечисления типов органических реакций и ее использование в программе ARGENT-1
85. **Трофимов М.И.** Применение индексов электроотрицательности органических молекул для решения общих задач химической информатики
86. **Туровский Н.А., Туровская Е.Н., Опейда И.А., Ракша Е.В., Кузнецова Н.А., Загладько Е.А.** Супрамолекулярный механизм активации ониевыми солями распада органических пероксидных соединений
87. **Фурер В.Л.** ИК спектроскопия фосфорорганических дендримеров и дендронов
88. **Цой О.Ю., Юхневич Г.В.** Ab initio расчет электрооптических параметров водородного мостика
89. **Цыганкова И.Г.** Корреляция молекулярной структуры и энергии диссоциации NH связи в аминах
90. **Чистяков А.Л., Станкевич И.В., Корлюков А.А.** Моделирование структуры и электронного строения допированных кристаллов на основе фуллерена C_{20}
91. **Шамсиев Р.С., Белов А.П.** Теоретическое исследование взаимодействия 1,3-бутадиена с тетрахлолопалладатом (II). Влияние растворителя и противоионов на кинетику и термодинамику процесса
92. **Шамсиев Р.С., Белов А.П.** DFT исследование процесса *син/анти* изомеризации в замещенных η^3 -аллильных комплексах палладия
93. **Шульга Д.А., Олиференко А.А., Писарев С.А., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.** Моделирование атомных *resp*-зарядов с помощью топологических схем расчета
94. **Элькин П.М., Бабков Л.М.** Структурно-динамические модели нитробензола в гетерогенных системах
95. **Элькин П.М., Эрман М.А., Пулин В.Ф.** Моделирование колебательных спектров биологически активных соединений урацилового ряда
96. **Эрман М.А., Элькин М.Д., Пулин О.В.** Колебательные спектры и электронная структура боразинов
97. **Ютилов Ю.М., Смоляр Н.Н.** Моделирование внутримолекулярных превращений 3-нитропиридон-4-она в условиях его гидразинолиза