

AMD
Processors

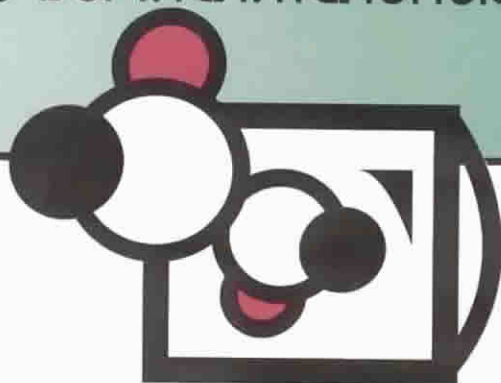
Генеральный спонсор Корпорация AMD

NC
Group

Главный организатор NC Group / НВК "ВИСТ"

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

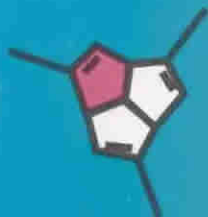
В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
НАУЧНЫХ ПРОБЛЕМ И
ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ



ХИМИИ,
БИОЛОГИИ,
ФАРМАЦЕВТИКИ,
МЕДИЦИНЫ

*Первая Национальная Конференция
Сборник тезисов докладов*

Москва - 2002



НИИ БИОМЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ им. В. Н. ОРЕХОВИЧА РАН
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ им. М. В. ЛОМОНОСОВА
БИОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ им. М. В. ЛОМОНОСОВА
ЦЕНТР ФОТОХИМИИ РАН
ПУЩИНСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РАН
ИНСТИТУТ БИООРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ
им. М. М. ШЕМЯКИНА и Ю. А. ОВЧИННИКОВА РАН
ИНСТИТУТ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ им. Н. Д. ЗЕЛИНСКОГО РАН
ИНСТИТУТ КРИСТАЛЛОГРАФИИ им. А. В. ШУБНИКОВА РАН

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ
В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУЧНЫХ
ПРОБЛЕМ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ ХИМИИ,
БИОЛОГИИ, ФАРМАЦЕВТИКИ, МЕДИЦИНЫ**

Первая Национальная Конференция

Сборник тезисов докладов

Генеральный спонсор Корпорация AMD

Главный организатор и спонсор NC Group / НВК «ВИСТ»

Сборник тезисов докладов Первой Национальной Конференции «Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных научных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики, медицины». М.: Научный и учебный методический центр, 2002. 175 с.

В сборнике представлены тезисы докладов Первой Национальной Конференции «Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных научных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики и медицины» (ИВТН-2002), в которых обсуждаются научные исследования и разработки в указанных областях, а также информационные и компьютерные технологии, являющиеся важным инструментом для достижения научных результатов.

**Генеральный спонсор Корпорация AMD
Главный организатор и спонсор компания NC Group/НБК «ВИСТ»**

**Спонсоры:
Компания «Экспресс Дистрибуция»
Компания РДТЕХ**

**Информационные спонсоры:
Издательский дом «Открытые системы»
Агентство научных новостей «Информнаука»
Интернет-портал www.Rusbiotech.ru**

Оргкомитет выражает большую благодарность всем спонсорам, поддержка и помощь которых обеспечили организацию и проведение Первой Национальной Конференции ИВТН-2002

Особую признательность и благодарность Оргкомитет выражает:
Генеральному спонсору Конференции Корпорации AMD,
Главному организатору и спонсору Компании NC Group / НБК «ВИСТ»,
чей вклад стал ключевым на всех этапах Конференции от замысла до заключительного заседания с вручением призов Дипломантам

**Ответственные за выпуск
Габусу Паулина, Чернин Игорь
(NC Group / НБК «ВИСТ»)**

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 1. МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВИБРОННЫХ СПЕКТРОВ С ВРЕМЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ И СМЕСЕЙ	14
С.А. Астахов, В.И. Баранов	
ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ИССЛЕДОВАНИИ РЕГУЛЯЦИИ МЕТАБОЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ. РЕГУЛЯЦИЯ СВЕРТЫВАНИЯ КРОВИ	15
Ф.И. Атауллаханов, Е.С. Лобанова, М.В. Пантелеев, Э.Э. Шноль, О.Л. Морозова, В.И. Зарницина	
АНАЛИЗ ДИАЛЕКТОВ ГЕНЕТИЧЕСКИХ КОДОВ НА ОСНОВЕ ИХ КОДОНОГРАММ	17
А.А. Баранова, М.Я. Эйнгорин	
МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В МОДЕЛИРОВАНИИ БЕЛКОВ И БЕЛОК-ЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ	18
И.И. Баскин, М.С. Беленикин, И.Г. Тихонова, В.А. Палюлин, Н.С. Зефиров	
ПРИМЕНЕНИЕ ТЕКСТУРНОГО АНАЛИЗА ИЗОБРАЖЕНИЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СИНТЕЗА ГЛИКОГЕНА В ГЕПАТОЦИТАХ КРЫС	19
Н.Н. Безбородкина, Г.И. Штейн	
НОВЫЙ МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ БЕЛКОВ В МЕМБРАНЕ	20
Я.А. Верещага, П.Е. Волынский, Д.Е. Нольде, Р.Г. Ефремов	
СОПОСТАВЛЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ МОНОАМИНОКСИДАЗЫ Б С КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛЬЮ АКТИВНОГО ЦЕНТРА ЭТОГО ФЕРМЕНТА	21
А.В. Веселовский, В.С. Скворцов, А.Е. Медведев, А.С. Иванов	
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ РИБОСОМНОГО БЕЛКА EсoS7	22
А.В. Головин, В.А. Спиридонова, А.М. Копылов	
3D-QSAR МЕТОД МУЛЬТИКОНФОРМАЦИОННОГО АНАЛИЗА БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ СОЕДИНЕНИЙ	22
М.А. Гришина, В.А. Потемкин, Р.М. Арсламбеков, А.В. Белик	
ТРЕБОВАНИЯ МЕТОДОВ СОВРЕМЕННОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ К ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМ ТЕХНОЛОГИЯМ	23
В.А. Дементьев	
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КЛЕТЧНОГО МЕТАБОЛИЗМА	24
Л. Н. Дроздов-Тихомиров	
МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕЛКОВ В МЕМБРАНАХ	27
Р.Г. Ефремов, Д.Е. Нольде, П.Е. Волынский, Н.П. Сырцев, А.С. Арсеньев	
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК МЕТОД ИЗУЧЕНИЯ ФОТОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ	27
С.В. Зеленцов	
ПУТЬ «ОТ ГЕНА ДО ЛЕКАРСТВА»: ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ	28
А.С. Иванов	
МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ БИОМЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК АМЕБОИДНОЙ КЛЕТКИ	31
Ф.Э. Ильясов, М.А. Морозов, В.А. Теплов	
ВИЗУАЛИЗАЦИЯ КРИСТАЛЛООПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ И ТКАНЕЙ В НОРМЕ И ПАТОЛОГИИ	32
М.С. Клейман, Э.М. Гильмияров	
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КАРДИОТОКСИНОВ С МЕМБРАНОЙ: РОЛЬ ЛОКАЛЬНЫХ КОНФОРМАЦИОННЫХ РАЗЛИЧИЙ И ГИДРОФОБНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК	33
А.Г. Кошнина, П.Е. Волынский, А.С. Арсеньев, Р.Г. Ефремов	
КАЧЕСТВЕННАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ПЕРОКСИДАЗЫ В ОНТОГЕНЕТИЧЕСКОМ РАЗВИТИИ ВЫСШИХ РАСТЕНИЙ НА ПРИМЕРЕ ЛЬНА	34
Г.П. Лапина, А.А. Лазарев	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ СТРЕССОУСТОЙЧИВОСТИ РАСТЕНИЙ	35
А.С. Лукаткин	
ПОДХОДЫ К ПРОГНОЗИРОВАНИЮ АНТИОКСИДАНТНЫХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ, ОСНОВАННЫЕ НА МЕТОДАХ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ	37
М.Ю. Маслов, Е.Б. Ослин, О.И. Алиев, А.С. Васильев	
КОМПЛЕКСНЫЙ КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПОДХОД В ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФАРМАКОЛОГИИ	38
Т.В. Мухина, С.О. Бачурин, Н.С. Зефиров	

НОВЫЕ МЕТОДЫ ПРЕДСКАЗАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ	39
В.А. Палолин, И.И. Баскин, Е.В. Радченко, Н.С. Зефирова	
ПРОГНОЗ ВОЗМОЖНОСТИ МЕТАБОЛИЗМА ВЕЩЕСТВ НА ИЗОФОРМАХ ЦИТОХРОМА P-450	40
А.А. Погребной, В.Е. Рябинин, Е.В. Барташевич, М.А. Гришина	
3D-MATRIX – НОВЫЙ АЛГОРИТМ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ, ОСНОВАННЫЙ НА МНОГОМЕРНОМ АНАЛИЗЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ДЕСКРИПТОРОВ СОВРЕМЕННЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ	41
А.В. Погребняк	
МОЖНО ЛИ УВИДЕТЬ ПРИЧИНУ БОЛЕЗНИ?	42
Е.П. Сидоров	
ЭФФЕКТИВНЫЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ	44
А.Л. Чугреев	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНАЛИЗА ИЗОБРАЖЕНИЙ В ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ ИЭФБ РАН	45
Г.Б. Белостоцкая, В.Г. Леонтьев	
 СЕКЦИЯ 2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ И РАСЧЕТНЫЕ ЗАДАЧИ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ	
НОВАЯ СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ	48
Д.Е. Абрамов, Н.Н. Буков, В.Т. Панюшкин	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В МОДЕЛИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ, КОНФОРМАЦИЙ И СВОЙСТВ ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ, ИХ Н-СВЯЗАННЫХ АССОЦИАТОВ И КОМПЛЕКСОВ ВКЛЮЧЕНИЯ	49
В.Г. Авакян, В.Б. Назаров, М.В. Алфимов	
НЕЭМПИРИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ НАНОТЕХНОЛОГИЙ	50
Е.С. Апостолова, А.П. Тихонов	
ОПЫТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СОВРЕМЕННЫХ ПЕРСОНАЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРОВ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ ВЫСОКОГО УРОВНЯ КОНФОРМАЦИОННЫХ И ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ	51
В.А. Батаев, А.В. Кудич, Е.К. Долгов, А.В. Абраменков, В.И. Пупышев, И.А. Годунов	
ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РАСЧЕТА СЛОЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ КОМПОНЕНТОВ РАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЫ ПО ДАННЫМ ЭПР СПЕКТРОСКОПИИ	53
С.Н. Болотин, А.И. Николаенко, Н.П. Крюкова, О.В. Стаценко	
ПАРАДИГМА ПРОГНОЗА СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ «МИКРОКОСМ»	54
П.М. Васильев	
ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ МАКРОМОЛЕКУЛЫ В РАСТВОРЕ. ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕТЕРМИНАНТ СТАБИЛЬНОСТИ МОЛЕКУЛ БЕЛКОВ И ИХ КОМПЛЕКСОВ С ЛИГАНДАМИ	54
Ю.Н. Воробьев	
ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ НЕФТЕПРОДУКТОВ И МИКРООРГАНИЗМОВ-ДЕСТРУКТОРОВ УГЛЕВОДОРОДОВ В ВОДНОЙ СРЕДЕ И АНАЛИЗА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА ОЧИСТКИ АКВАТОРИЙ СОРБЦИОННО-МИКРОБИОЛОГИЧЕСКИМ МЕТОДОМ	56
В.К. Григорьев, И.В. Бойкова, И.И. Новикова, О.А. Аксенов	
ВНУТРИ И МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ ЦИКЛИЧЕСКИХ И КОНДЕНСИРОВАННЫХ ЕНОЛОВ. РАСЧЕТЫ АВ INITIO И DFT	57
В.В. Громак, В.Г. Авакян, Е.С. Головачев	
НЕЭМПИРИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ АДСОРБЦИИ И ПРЕДСКАЗАНИЕ УДЕРЖИВАНИЯ В ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ ПО СТРОЕНИЮ МОЛЕКУЛ	59
А.М. Долгоносов	
АДЕКВАТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОННОЙ ХРОМАТОГРАФИИ С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ IONCHROM	60
А.М. Долгоносов, А.Г. Прудковский, Н.К. Колотилина	
МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ БЕЛОК-БЕЛКОВОГО УЗНАВАНИЯ: I. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ОБЛАСТЕЙ КОНТАКТА В БЕЛОК-БЕЛКОВЫХ КОМПЛЕКСАХ	61

Л.Н. Дроздов-Тихомиров, Д.М. Линде, В.В. Поройков, А.А. Александров, Г.И. Скурида, П. Ковалев, В. Потапов	
СОВМЕСТНОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ И СИМВОЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В СИСТЕМЕ МАТЛАВ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ РАСЧЕТОВ ИНТЕГРАЛОВ ПЕРЕКРЫВАНИЯ	62
Г.Г. Дьяченко	
О ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВАХ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАШИН НА ПРИМЕРЕ РЕТИНАЛЯ	62
К.Б. Егорова, К.В. Шайтан	
ПРИМЕНЕНИЕ НЕЭМПИРИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ РЕАКЦИИ ПЕРЕНОСА ПРОТОНА В НИТРОНАХ	64
Е.А. Ермакова, Р.М. Аминова	
МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕРДЕЧНЫХ РИТМОВ	64
Е.А. Жучкова, А.Ю. Лоскутов, С.Д. Рыбалко	
СЕТЬ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В МОЛЕКУЛЕ НЕЙРОТОКСИНА-II: ДАННЫЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР	65
Ю.А. Косинский, А.С. Арсеньев, Р.Г. Ефремов	
ВЫБОР КЛАСТЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЦИТОХРОМОВ	66
Т.А. Романова, П.О. Краснов, П.В. Аврамов, А.А. Кузубов	
ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ВЫСОКОСИММЕТРИЧНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ	67
А.А. Кузубов, Ф.Н. Томилин, П.В. Аврамов	
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЖФАЗНЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ ХИМИИ	68
Н.А. Макрушин, А.И. Ермаков, А.А. Свечникова, В.Ю. Машутин, А.Н. Дубенков	
НОВЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ АКТИВНОСТЕЙ МОНОМЕРОВ В РАДИКАЛЬНОЙ СОПОЛИМЕРИЗАЦИИ	69
А.С. Мальшев, Ю.Е. Беганцова, С.Д. Зайцев, Ю.Д. Семчиков	
ИНФОРМАЦИОННЫЕ ПОЛЯ КАК ОСНОВА ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ	70
Ю.Г. Марков	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИВТ В ТЕРМОДИНАМИКЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ СОЛЕЙ Na, K	72
В.А. Монич, В.Ф. Лазукин	
УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ВЕБ-ИНТЕРФЕЙС ДЛЯ ПРОГРАММ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ	73
А.А. Московский, А.А. Грановский, А.В. Немухин, Д.А. Фирсов	
МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ДВУМЕРНОГО АТЛАСА КАРТИН ЭКСПРЕССИИ ГЕНОВ IN SITU	74
А. Писарев, Е. Мясникова, М. Самсонова	
РЕАЛИЗАЦИЯ ГИБРИДНЫХ МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ МЕХАНИКИ (КМ/ММ) ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОХИМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ	75
А.В. Немухин, Б.Л. Григоренко, А.А. Грановский, А.В. Боченкова, Е.М. Епифановский	
ФОРМИРОВАНИЕ НОВЫХ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ НА ОСНОВЕ КВАНТОВО- ХИМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ЛКАО МО ССП КВ ДЛЯ НАПРАВЛЕННОГО СИНТЕЗА НОВЫХ ГЕТЕРОАРОМАТИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ	75
А.Е. Обухов	
КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ И ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ СУБСТРАТА И ИХ АДДУКТОВ С ПАРАМАГНИТНЫМИ ЗОНДАМИ В РАСТВОРАХ РАЗНОЙ ПРИРОДЫ В ХИМИИ И БИОЛОГИИ	77
А.Е. Обухов	
ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ЛКАО МО ССП КВ ЧПДП-S И ППП-S ДЛЯ РАСЧЕТА ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГРУПП АТОМОВ В ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЯХ В КАЧЕСТВЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ	79
А.Е. Обухов, Л.И. Бельный	
ОЦЕНКА РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ИСХОДНЫХ И ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ЧАСТИЦ В РЕАКЦИЯХ ФУНКЦИОНАЛИЗОВАННЫХ АРЕНОВ С ЭЛЕКТРОНОДОНОРНЫМИ АГЕНТАМИ	80
А.И. Русаков, В.Ю. Орлов, А.С. Мендкович, А.Д. Котов	
АДДИТИВНАЯ СХЕМА ПРИ ПЕРЕНОСЕ СИЛОВЫХ ПОСТОЯННЫХ И МАСШТАБИРОВАНИИ СИЛОВОГО ПОЛЯ	81
Ю.Н. Панченко, Ж.Р. Де Марэ	
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КЛЕТОЧНОГО ЭФФЕКТА В КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ	82
Е.М. Пестряев	

ПРИМЕНЕНИЕ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР И СОВРЕМЕННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМ СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФАРМАКОЛОГИИ	84
В.И. Польшаков	
РОЛЬ ДАЛЬНЕГО ПОРЯДКА В ФОРМИРОВАНИИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В ТРАНСЛЯЦИОННО-ИНВARIANTНЫХ СИСТЕМАХ	85
Ю.Н. Журавлев, А.С. Поплавной	
ОБРАБОТКА МНОГОЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ ОГИБАЮЩИХ СИГНАЛОВ СПИНОВОГО ЭХА В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ЯДЕРНОЙ МАГНИТНОЙ РЕЛАКСАЦИИ	86
С.М. Прудников, Л.В. Зверев, Т.Е. Джиоев	
ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ ЛИПИДОВ И ЛИПИДНЫХ	87
МЕМБРАННЫХ СИСТЕМ МЕТОДАМИ ИМИТАЦИОННОГО КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ	
А.Л. Рабинович, П.О. Рипатти, Н.К. Балабаев	
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ НАНОЧАСТИЦ СО СТРУКТУРОЙ ФУЛЛЕРЕНА	88
А.Б. Свечников	
КОМПЬЮТЕРНЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОСТАВА СЛОЖНЫХ РЕАКЦИОННЫХ СМЕСЕЙ ПО СПЕКТРАМ ПОГЛОЩЕНИЯ	89
С.В. Зеленцов, И.В. Симдянов	
«НУВОТ+» И «3D НУВОТ» ДЛЯ UNIX, ТЕКУЩИЕ ВОЗМОЖНОСТИ И ИНТЕГРАЦИЯ С SYBYL	90
В.С. Скворцов, О.А. Раевский	
ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОМОТОРНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ E.COLI И РАННИХ ОБЛАСТЕЙ ГЕНОМОВ ФАГОВ T4 И T7	92
А.А. Сорокин, Т.Р. Джелидин, Н.Н. Иванова, В.С. Сивожелезов, Р.В. Полозов, С.Г. Камзолова	
ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ И РАЗДЕЛЕНИЯ МНОГОЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ СТРУКТУРЫ РАСТВОРОВ	93
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ И МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ СТРУКТУРЫ И ЭНЕРГИИ СВЯЗЫВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ БИС-(18-КРАУН-6)-СТИЛЬБЕНА С ПРОИЗВОДНЫМИ ДИПИРИДИЛ-ЭТИЛЕНА, СОДЕРЖАЩИМИ ДВЕ КОНЦЕВЫЕ АММОНИЙАЛКИЛЬНЫЕ ГРУППИРОВКИ	94
Т.В. Титков, В.Г. Авакян, С.П. Громов, М.В. Алфимов	
ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОЙ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ ХИМИИ	96
А. В. Титов	
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ХЛОРИРОВАНИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И СПИРТОВ В ВОДНОЙ СРЕДЕ	96
Н.В. Харчевникова	
NANORACK И NANOVIBR: ПРОГРАММЫ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ БОЛЬШИХ СИСТЕМ В SP- И SPD-БАЗИСЕ	97
П.К. Берзигияров, В.А. Заец, И.Я. Гинзбург, В.Ф. Разумов, Е.Ф. Шека	
ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ПОВЕРХНОСТЬ И ДИНАМИКА МОЛЕКУЛ С КОНФОРМАЦИОННЫМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ	98
К.В. Шайтан	
ОРГАНИЗАЦИЯ НАУЧНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ, КАК РАЗВИВАТЬ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СРЕДСТВА	101
О.В. Михеев	
НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ПОСТРОЕНИЯ И ИСПОЛЬЗОВАНИЯ LINUX-КЛАСТЕРОВ	106
О.В. Михеев, И.Ю. Тимофеев	
«ПОДВОДНЫЕ КАМНИ» ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ	109
Р.Ф. Васильев	
СЕКЦИЯ 3. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БД В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ. ИНФОРМАЦИОННЫЕ, ЭКСПЕРТНЫЕ СИСТЕМЫ. АНАЛИЗ ДАННЫХ (DATA MINING). РАЗРАБОТКА БД. ХРАНЕНИЕ ДАННЫХ, ОРГАНИЗАЦИЯ ДОСТУПА, ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЙ ПОИСК	
КОМПЬЮТЕРНАЯ ЭНЦИКЛОПЕДИЯ ПО МОЛЕКУЛЯРНОЙ И ОБЩЕЙ БИОЛОГИИ ЧЕЛОВЕКА. (БАЗА ЗНАНИЙ ПО БИОЛОГИИ ЧЕЛОВЕКА HUMBIO)	112
А.А. Александров	
ЭЛЕКТРОННЫЙ БЕЛКОВЫЙ ПАСПОРТ КУЛЬТУРНЫХ РАСТЕНИЙ	113
Н.В. Алпатьева, Е.Г. Лебедева, Т.С. Разоренова, Н.К. Губарева, А.В. Конарев	

MEMBRANEEXPERT – БАЗА ДАННЫХ ИОНООБМЕННЫХ МЕМБРАН И ИХ СВОЙСТВ	114
Д.Л. Белов, Е.И. Володина	
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ПРОТИВОДЕЙСТВИЯ	115
АКТАМ БИОЛОГИЧЕСКОГО ТЕРРОРИЗМА	
Б. В. Боев	
ГИС-ТЕХНОЛОГИИ В ИЗУЧЕНИИ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗООАНТРОПОНОЗНОЙ	117
МИКРОСПОРИИ	
Б.В. Боев, Т.В. Рубашева, Ж.В. Степанова	
«BIOLUMBASE» – БАЗА ДАННЫХ МИКРООРГАНИЗМОВ С МАРКЕРНЫМИ LUX-ГЕНАМИ	118
С.Е. Медведова, А.Н. Бояндин, Д.А. Котов, Л.Ю. Попова	
IT ТЕХНОЛОГИИ И ГЕНОМНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ. СРАВНЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОБИЛЬНЫХ	119
ЭЛЕМЕНТОВ В ДНК ЧЕЛОВЕКА И ШИМПАНЗЕ; СОЗДАНИЕ КОНСЕНСУСНОЙ	
ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ДВУХ ЧЕЛОВЕК-СПЕЦИФИЧЕСКИХ СЕМЕЙСТВ РЕТРОТРАНСПОЗОНОВ И	
ОТКРЫТИЕ В ЧЕЛОВЕЧЕСКОМ ГЕНОМЕ СЕМЕЙСТВА ХИМЕРНЫХ РЕТРОЭЛЕМЕНТОВ,	
ОБРАЗОВАННЫХ ПО ПРИНЦИПИАЛЬНО НОВОМУ МЕХАНИЗМУ	
А.А. Бuzдин, К.В. Ходосевич, С.В. Устюгова, Е.В. Гогвадзе, И.З. Мамедов, Ю.Б. Лебедев, Е.Д. Свердлов	
ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ КОМПОНЕНТА СИСТЕМЫ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ	120
ИДЕНТИФИКАЦИИ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ	
Е.И. Абрамов, Н.Н. Буков, В.Т. Панюшкин	
MEMBRANEEXPERT – БАЗА ДАННЫХ ИОНООБМЕННЫХ МЕМБРАН И ИХ СВОЙСТВ	121
Д.Л. Белов, Е.И. Володина	
РОЛЬ МИКРОЭЛЕМЕНТОВ В АНАБОЛИЗМЕ. ЧТО ОБ ЭТОМ ГОВОРIT ИНТЕРНЕТ?	123
А.И. Воропаев	
ПРОГРАММНОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТА ПРАЙМЕРОВ, ПОЗВОЛЯЮЩИХ ПРОВОДИТЬ ПЦР-	124
ТИПИРОВАНИЕ	
С.Б. Гаранина, Ю.И. Ящечкин, А.Н. Куличенко	
МОДЕЛИРОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКСИДЛЕНИЯ МИОГЛОБИНА	125
Е.В. Гораев, Г.Б. Постникова, В.С. Сивожелезов	
РАЗРАБОТКА СТРАТЕГИИ КОМПЬЮТЕРНОГО ПОИСКА ФУНКЦИОНАЛЬНО АНАЛОГИЧНЫХ	126
БЕЛКОВ У ЭВОЛЮЦИОННО ДАЛЕКИХ ОРГАНИЗМОВ	
Ю.Ф. Богданов, С.Я. Дадашев, Т.М. Гришаева	
СОЗДАНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКИХ БАЗ ДАННЫХ И ЭКСПЕРТНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРИКЛАДНЫХ	127
ЗАДАЧ ГЕНЕТИКИ И СЕЛЕКЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОСЕТЕВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ	
С.Я. Дадашев, В.В. Руанет, А.М. Кудрявцев	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НОВОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ ОБОБЩЕННОГО СПЕКТРАЛЬНО-	129
АНАЛИТИЧЕСКОГО МЕТОДА В ЗАДАЧАХ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ	
Л.И. Куликова, Ф.Ф. Дедус, С.А. Махортых	
ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ДЛЯ АВТОМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ, НАКОПЛЕНИЯ И	129
СТАТИСТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ЦИТОГЕНЕТИЧЕСКИХ ДАННЫХ	
К.Н. Дудкин, С.В. Миронов	
ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ	13
АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ	
Е.А. Заботкина	
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ «ДОБЫЧИ ЗНАНИЙ» (DATA MINING) В КООРДИНАЦИОННОЙ ХИМИИ	131
В.В. Зернов, И.В. Плетнев	
ФРАГМЕНТНАЯ ЛИНЕЙНАЯ НОТАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ ФОРМУЛ МОЛЕКУЛ	133
А.Я. Зильберштейн, А.Е. Сельков	
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ И УПРАВЛЕНИЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БАЗ ДАННЫХ ВИДЕОИЗОБРАЖЕНИЙ	133
БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ НА ПРИМЕРЕ ШИРОКОГО КЛАССА БИОФИЗИЧЕСКИХ	
САМООРГАНИЗУЮЩИХСЯ СИСТЕМ	
Г.Р. Иваницкий	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ МИТОХОНДРИАЛЬНОЙ ДНК ПРИ ПОДБОРЕ	134
ЭФФЕКТИВНОЙ СИСТЕМЫ ПЦР-ФИНГЕРПРИНТИНГА ДЛЯ ПОИСКА ГЕНОВ СИСТЕМЫ ЦМС У	
САХАРНОЙ СВЕКЛЫ	
М.К. Иванов, А.С. Ревенко, М.Р. Кабилов, Г.М. Дымшиц	
ПРИМЕНЕНИЕ БАЗ ДАННЫХ ДЛЯ УЧЕТА И ОЦЕНКИ ГЕНЕТИЧЕСКОГО ФОНДА ДРЕВЕСНЫХ	135
РАСТЕНИЙ	
В.А. Кострикин, С.Г. Кобзева	

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ ГЕЛИОГЕОМАГНИТНЫХ ПАРАМЕТРОВ НА ТЕХНОГЕННЫЕ АВАРИИ В ВЕРХНИХ ГЕОСФЕРАХ С.И. Козлов, А.С. Кравчук, А.Б. Хрусталеv	136
VIOML – BIOLOGICAL UNIFIED MODELING LANGUAGE Ф.А. Колпаков	136
РЕГИСТРАЦИЯ СИГНАЛОВ ПРИ ЭЛЕКТРОАНАЛИТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ С ПОМОЩЬЮ КОМПЬЮТЕРА И УНИВЕРСАЛЬНОГО АНАЛОГО-ЦИФРОВОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ А.С. Коротков, В.В. Ягов, Б.К. Зуев	137
НЕЙРОСЕТЕВЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ РАБОТЫ С БАЗАМИ ДАННЫХ Ю.П. Ланкин	138
ЦИФРОВЫЕ БИБЛИОТЕКИ ИЗОБРАЖЕНИЙ РАСТЕНИЙ С.А. Баландин, С.Р. Майоров, С.С. Симонов, Д.Д. Соколов	139
МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИНИТНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ СИСТЕМ НА КОМПАКТНЫХ НОСИТЕЛЯХ С ПОМОЩЬЮ В-СПЛАЙНОВ С ВЫРОЖДЕННЫМ НАБОРОМ УЗЛОВ С.А. Безносюк, Д.А. Мезенцев	141
КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ РЕГУЛЯТОРНЫХ РАЙОНОВ ГЕНОВ ЭУКАРИОТ МЕТОДАМИ DATA MINING Ю.Л. Орлов, Е.Е. Витяев, Н.А. Колчанов	142
NETLABORATORY – ИНТЕГРИРОВАННАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ РАСЧЕТОВ И ВЕДЕНИЯ БАЗ ДАННЫХ В ОБЛАСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ХИМИИ И.В. Плетнев, А.Л. Чугреев, В.Н. Емельянов	143
ПРИМЕНЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННО-КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ НА БАЗЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ В.В. Руанет, А.К. Хетагурова, С.Я. Дадашев	144
ИНТЕРНЕТ-СИСТЕМА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ А.В. Садым, А.А. Лагунин, Д.А. Филимонов	145
ВЫЧИСЛЕН «АТЛАС МЕТАМЕРНОЙ МЕДИЦИНЫ» Е.П. Сидоров	146
ПУШКИНСКИЙ ВИРТУАЛЬНЫЙ БИОЛОГИЧЕСКИЙ МУЗЕЙ – ПЕРВЫЙ ГОД РАБОТЫ Х.П. Тирас, Э.Ф. Ильясов, А.Б. Петров	148
СОЗДАНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ БОЛЕЗНЕЙ ОРГАНОВ ДЫХАНИЯ Н.В. Ульянычев	149
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ БАЗЫ ДАННЫХ ДЛЯ КЛИНИКО-ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ СОСТОЯНИЯ ЗДОРОВЬЯ СТУДЕНТОВ Н.В. Ульянычев, А.В. Лейфа, Ю.М. Перельман	150
КОМПЬЮТЕРНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ АДАПТИВНОГО БИОУПРАВЛЕНИЯ ФУНКЦИЯМИ С ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ НА ОСНОВЕ РЕЗОНАНСНЫХ СВОЙСТВ ЦНС А.И. Федотчев, А.Т. Бондарь	151
ПРИМЕНЕНИЕ MICROSOFT EXCEL ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ГИДРОЛИЗА СУБСТРАТОВ БАКТЕРИАЛЬНОЙ НУКЛЕАЗОЙ М.Н. Филимонова, Н.Н. Филимонов	152
ПОИСК ЧЕЛОВЕК-СПЕЦИФИЧНЫХ УЧАСТКОВ ИНТЕГРАЦИИ LTR NERV-K И АНАЛИЗ ГЕНОМНОГО ОКРУЖЕНИЯ ЧЕЛОВЕК-СПЕЦИФИЧНЫХ LTR К.В. Ходосевич, А.А. Буздин, Ю.Б. Лебедев	153
КОМПЛЕКСНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И ЯКР ³⁵ СІ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ ОРГАНИЧЕСКОЙ И ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ В.П. Фешин, Д.Б. Шляпников	154
ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦИИ КИНЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ В.Б. Луппу, В.Г. Рыболовлев, А.В. Савлук, А.С. Харитонов, К.С. Шубников	155
КОРРЕЛЯЦИОННАЯ РАЗМЕРНОСТЬ В АНАЛИЗЕ ЭЭГ А.С. Эйдукайтис, М.В. Яценко	157
РЕГИСТРАЦИЯ СИГНАЛОВ ПРИ ЭЛЕКТРОАНАЛИТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ С ПОМОЩЬЮ КОМПЬЮТЕРА И УНИВЕРСАЛЬНОГО АНАЛОГО-ЦИФРОВОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ А.С. Коротков, В.В. Ягов, Б.К. Зуев	158
ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА МОЛЕКУЛЯРНО-ЭПИДЕМИОЛОГИЧЕСКОГО АНАЛИЗА Ю.И. Ящечкин, А.Н. Куличенко, Е.В. Куклев	159

**СЕКЦИЯ 4. ПРОБЛЕМЫ ЛОКАЛЬНОГО И ГЛОБАЛЬНОГО ОБЪЕДИНЕНИЯ
ИНФОРМАЦИОННЫХ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ ПРИ РЕШЕНИИ НАУЧНО-
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ ЗАДАЧ. КОНЦЕПТУАЛЬНЫЕ И ОБЩИЕ ВОПРОСЫ ИТ В НАУКЕ**

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ В ИНСТИТУТЕ БИОФИЗИКИ КЛЕТКИ РАН	162
В.М. Комаров, А.В. Кабанов	
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ И ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ КЛАСТЕРОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ	162
М.Б. Кузьминский, А.Ю. Мускатин	
СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К КОМПЬЮТЕРНОМУ ОБЕСПЕЧЕНИЮ ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ	163
А.С. Мендкович	
ОРГАНИЗАЦИЯ ЦЕНТРА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ КАЗАНСКОГО НЦ РАН	164
Г. Шапов, М. Астафьев	
ДНК-СВЯЗАННЫЕ ЛИПИДЫ: МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДНК С ЦИС-ТРАНС-СТЕРЕОИЗОМЕРАМИ ЖИРНЫХ КИСЛОТ	165
П. Н. Дьячков, Н. Б. Стражевская, В. А. Стручков, Е. П. Дьячков, Р. И. Жданов	
ХИМИЯ ПРОЦЕССОВ СОАНАБОЛИЗМА МИКРОЭЛЕМЕНТОВ В БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ: ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ И ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ	166
А.Г. Карабаш, М.А. Елисева	
ПОЛУЧЕНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННЫХ ДАННЫХ ПО ЭКСПРЕССИИ ГЕНОВ IN SITU ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ ПРОЦЕССА СЕГМЕНТАЦИИ У ДРОЗОФИЛЫ	167
Е. Мясникова, К. Козлов, С. Суркова, М. Самсонова	
ПРОБЛЕМЫ ОЦЕНКИ ЭЛЕКТРОННЫХ ПАРАМЕТРОВ СТРУКТУРЫ И ГЕНОТОКСИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ	169
В.Ю. Орлов, А.Д. Котов, И.Н. Соковикова	
ИНФОРМАЦИОННО ЗНАЧИМЫЕ СЛОВА НУКЛЕОТИДНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ	170
М.А. Мамонова, М.Г. Садовский	
МИКРО-АЭРО-ГИДРОДИНАМИКА: МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПОТОКИ ВБЛИЗИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ И В УЗКИХ ПОРАХ	171
Ю.К. Товбин	
ИНФОРМАЦИОННАЯ ЕМКОСТЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАШИНЫ В СЛУЧАЕ РЕЗОНАНСНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	171
В.С. Цыганков, А.О. Кучеренко, Л.К. Охотникова	
ИНФОРМАЦИОННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ГЕНЕТИКИ	173
М. Я. Эйнгорин	