

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ  
ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ  
И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ**

**Сессия ИВТН-2007**



**COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES**

**IVTN-2007 Session**

Сборник материалов  
The Proceedings



Москва – 2007  
Moscow - 2007

**ИВТН.ru – электронные конференции**  
Информационно-Вычислительные Технологии в Науке

Главный организатор - NC Group/НБК "ВИСТ"  
При поддержке Zenon N.S.P.

**IVTN.ru – web conferences**  
Computer Applications in Science

Provided by NC Group/NVK "VIST"  
Supported by Zenon N.S.P.

Руководитель проекта ИВТН.ru *Габусу Полина*  
Исполнительный секретарь ИВТН.ru *Пшеничникова Наталья*

IVTN.ru Project Leader *Gabusu Paulina*  
IVTN.ru Executive Secretary *Pshenichnikova Natalia*

Организационный комитет выражает благодарность всем участникам сессии ИВТН-2007  
The Organizing committee thanks all of the participants of the IVTN-2007 session

В сборнике материалов сессии ИВТН-2007 представлены аннотации докладов, опубликованных на ИВТН.ru в 2007 году. К публикациям относятся доклады электронных конференций "Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных научных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики, медицины" и "Информационно-вычислительные технологии в фундаментальных и прикладных физико-математических исследованиях", доклады 5-ой Всероссийской конференции «Молекулярное моделирование», работы СМТPI-2007 и материалы, опубликованные в рамках ИВТН-2007. В докладах обсуждаются научные исследования и разработки в указанных областях, а также информационные и компьютерные технологии, являющиеся важным инструментом для достижения научных результатов.

These proceedings of the IVTN-2007 session present annotations of the reports published at IVTN.ru in 2007. Publications include reports of web-conferences "Computer Applications in fundamental and applied Chemistry, Biology, Pharmaceutics and Medicine" and "Computer Applications in fundamental and applied Physics and Mathematics", reports of the 5th all-Russia conference "Molecular modeling", СМТPI-2007 papers and materials published within the framework of the IVTN-2007. The reports feature discussions of scientific researches and developments in the above areas and computer technologies as an important driver for scientific deliverables.

© NC Group / НБК «ВИСТ»  
© NC Group / NVK «VIST»

Дорогие друзья!

В этом году проект ИВТН.ru – электронные конференции «Информационно – Вычислительные Технологии в Науке» предоставляет возможность для диалога ведущих ученых, заинтересованных в использовании информационных технологий в своих научных исследованиях и разработчиков компьютерных систем и программных продуктов.

Проект ИВТН.ru объединяет более 1800 специалистов российских и зарубежных компаний – производителей оборудования, программного обеспечения, а также представителей организации, оказывающих финансовую, техническую, информационную и иную поддержку исследовательской деятельности.

Сборник материалов ИВТН.ru 2007 года содержит не только краткие сообщения, но и научные статьи и доклады, опубликованные авторами на страницах различных научных изданий, в сборниках материалов конференций, съездов, симпозиумов, что позволит участникам проекта более подробно ознакомиться с результатами исследований в различных областях науки.

Оргкомитет благодарит всех участников конференции за предоставленные доклады и сообщения и выражает уверенность в том, что сессии ИВТН.ru и в дальнейшем будут такими же яркими и содержательными.

Организационный комитет ИВТН.ru

Dear Friends!

This year the project "IVTN.ru – web-conferences "Computer application in science" grants an opportunity for dialogue between leading scientists interested in computer application in scientific researches and computer systems and software products developers.

The project IVTN.ru includes over 1800 specialists of Russian and foreign companies engaged in hardware and software production and representatives of organizations rendering financial, technical, informational and other support for research activities.

In addition to summaries, proceedings of the project IVTN.ru - 2007 contain scientific articles and reports published by the authors in various scientific publications, proceedings of conferences, congresses, round-tables that will allow a detailed familiarization of the project participants with research deliverables in various fields of science.

The Organizing Committee would like to thank all the participants for the reports and statements provided and express confidence that IVNT.ru session will be not less outstanding and informative in the future.

IVTN.ru Organizing Committee



**ИВТН-2007  
IVTN-2007**



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

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В  
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ ФИЗИКО-  
МАТЕМАТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ**

---

**COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL  
AND APPLIED CHEMISTRY, BIOLOGY, PHARMACEUTICS AND  
MEDICINE**

**COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL  
AND APPLIED PHYSICS**

**Организаторы  
Providers**

Конференции ИВТН-2007 организованы по инициативе NC Group/НВК "ВИСТ", при поддержке научных центров и институтов Российской Академии Наук и Российской Академии Медицинских Наук.

The IVTN-2007 Conferences were initially organized by NC Group/NVK "VIST" and supported by Scientific Centers and Institutes of Russian Academy of Sciences and Russian Academy of Medical Sciences.

<http://www.ivtn.ru>

**СЕКЦИЯ 1****ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ  
И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В НАУКЕ****SECTION 1****GENERAL PROBLEMS AND PROSPECTS OF COMPUTER APPLICATIONS IN  
SCIENCE****АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ВОПРОСНО-ОТВЕТНАЯ  
СИСТЕМА ОБУЧЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИМ  
ДИСЦИПЛИНАМ****Богатов Н.М.**

Кубанский государственный университет

**THE AUTOMATED QUESTION-ANSWER SYSTEM FOR  
TRAINING TO PHYSICAL DISCIPLINES****Bogatov N.M.**

Kuban State University

Создана информационная система анализа текста на естественном языке, позволяющая определять правильность ответа экзаменуемого человека. Рассмотрены структура, принцип работы системы, результаты тестирования студентов-физиков

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=660>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=660>

The information system of the text analysis in the natural language is created. This system allows analyzing the answers of the examined man. The system's structure, performance's principle, test's results of students - physicists are considered

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=660](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=660)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=660](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=660)

**ХИМИЧЕСКАЯ ИНФОРМАЦИОННО-  
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА В GRID-СРЕДЕ****Кузьминский М.Б., Мендкович А.С., Мускатин А.Ю.,  
Аникин Н.А., Захарова М. Н.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

**CHEMICAL INFORMATIONAL AND COMPUTATIONAL  
SYSTEM IN GRID ENVIRONMENT****Kuzminsky M.B., Mendkovich A.S., Muskatina A.Y.,  
Anikin N.A., Zaharova M.N.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

В рамках проекта РФФИ 05-07-90305 создается интегрированная в среду GRID информационно-вычислительная система (ИВС), ориентированная в первую очередь на решение задач квантовой химии. Для поддержания работы в GRID использованы средства Globus Toolkit и OGSA-DAI для обеспечения интероперабельности баз данных (БД) в ИОХ РАН и в Ярославском госуниверситете. Для БД применяется СУБД PostgreSQL и MySQL соответственно. ИВС включает также графический интерфейс пользователя и вычислительные ресурсы

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=969>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=969>

Oriented to quantum chemistry, integrated in GRID environment informational and computational system (ICS) is developing in the frames of RFBR grant 05-07-90305. Globus Toolkit is used for support of GRID functionality, and OGSA DAI is used for interoperability of DBs in IOCh RAS and Yaroslavl State University. DBMSs PostgreSQL and MySQL are used for this DBs correspondingly. ICS includes also users graphical Web-interface and computational resources of clusters

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=969](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=969)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=969](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=969)

## СЕКЦИЯ 3

## МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

## SECTION 3

## COMPUTER SIMULATION

**ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛЬНОЕ  
ПРЕДСТАВЛЕНИЕ И ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ  
ЗАДАЧИ КЕПЛЕРА**

**Крутов А.В., Лабuzов А.С., Мухоедов Д.С., Тасенко  
В.И., Семенюта Д.В., Глазков А.Н.**  
Елецкий государственный университет

На существование ряда задач, имеющих геометрическую сущность, но считавшихся в исходной постановке динамическими, указывается в [1], где отмечается также, что и в динамических задачах геометрические свойства оказывают существенное влияние на решение. Это обуславливает эффективность геометрического подхода, в частности, в задачах небесной механики

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=532>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=532>

**GEOMETRIC MODEL REPRESENTATION AND  
NUMERICAL ANALYSIS OF THE KEPLER PROBLEM**

**Krutov A.V., Labuzov A.S., Muhoedov D.S., Tsenko  
V.I., Semenyuta D.V., Glazkov A.N.**  
Yelets State University

The existence of certain problems of the geometric nature, which were believed to be dynamic in the original formulation, was noted in [1]; in the same paper it was also pointed out that the geometric properties can have a considerable effect on the solution of dynamic problems. This determines the efficiency of the geometric approach, in particular, to the celestial mechanics problems

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=532](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=532)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=532](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=532)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ УГЛЕРОДНАЯ  
НАНОТРУБКА - НАНОЧАСТИЦА НИКЕЛЯ**  
**Свечников А.Б.**

Российский научный центр "Курчатовский Институт"

Представлены результаты теоретического моделирования элементарных процессов в систем, образованной наночастицей никеля, содержащей растворённые атомы углерода, и углеродной нанотрубкой (7, 0). Рассчитаны энергетические характеристики процессов адсорбции, поверхностной диффузии и встраивания атомов в вакантные положения. Предложены три возможных механизма роста УНТ на наночастице, которые не являются взаимоисключающими

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=662>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=662>

**THE MODEL OF THE SYSTEM CARBON NANOTUBE –  
NICKEL NANOPARTICLE**  
**Svechnikov A.B.**

The Russian Research Centre Kurchatov Institute

The elemental atomic processes have been analyzed for the system consisted of a nickel nanoparticle that was diluted with carbon atoms and CNT (7, 0). The values of adsorption energies, diffusion barriers and incorporation parameters for atoms were calculated. Three different kinetic mechanisms for the CNT growth process had been proposed

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=662](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=662)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=662](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=662)

**СВОБОДНЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ  
СТАТИЧЕСКИ ИЗОГНУТОГО ТРУБОПРОВОДА**  
**Хакимов А.Г.**

Институт механики уфимского научного центра РАН

Исследуются свободные пространственные колебания статически изогнутого двухопорного трубопровода с рабочей средой. Рассматриваются нелинейные свободные колебания трубы и заключенной в ней жидкости относительно горизонтальной оси и изгибные колебания по главной форме в плоскости трубы

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=962>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=962>

**FREE SPATIAL OSCILLATIONS OF A STATICALLY  
BENT PIPELINE**  
**Khakimov A.G.**

Institute of Mechanics of the Ufa Branch of Russian Academy of Sciences

The free spatial oscillations of a statically bent double-seat pipeline filled with a working medium are studied. The nonlinear free oscillations of the pipe and the fluid contained in it relative to the horizontal axis and the bend oscillations of the basic form in the pipe plane are considered

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=962](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=962)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=962](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=962)

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЦЕНТРОБЕЖНОГО РАЗДЕЛЕНИЯ СУСПЕНЗИЙ В СРЕДЕ MAPLE

Павлова Н.В., Павлов И.Н., Тушкина Т.М.  
Бийский технологический институт

В процессе работы созданы физико-математическая модель, расчетный алгоритм и программные средства для исследования структуры потоков в роторе центрифуги. Проведен анализ влияния конструктивных и физических параметров на процесс разделения суспензии в роторах различных конструкций. Разработанные программные средства применены для численного решения задач в гидродинамике центробежного разделения и анализа влияния конструктивных и технологических параметров на обстановку в роторах центрифуг

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=661>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=661>

### MODELING THE PROCESS OF CENTRIFUGAL SUSPENSION SEPARATION IN THE MAPLE ENVIRONMENT

Pavlova N.V., Pavlov I.N., Tushkina T.M.  
Biysk Tehnological Institute

A physicomathematical model, a computational algorithm, and software are developed for studying the structure of the flows in the centrifuge rotor. The effect of the design and physical parameters on the suspension separation process is analyzed for rotors of different design. The software developed is employed for numerically solving the hydrodynamic problems of the centrifugal separation and analyzing the effect of the design and process parameters on the conditions in centrifuge rotors

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=661](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=661)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=661](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=661)

### ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕРМОУПРУГОГО ПОЛЯ КРУГЛОЙ ПЛАСТИНЫ, ФОРМИРУЕМОГО НЕОСЕССИМЕТРИЧНЫМИ ТЕМПЕРАТУРНЫМИ ВОЗДЕЙСТВИЯМИ

Рослякова И.С.  
Московский государственный технический университет им. Н.Э.Баумана

В статье представлен расчет и анализ напряженно-деформированного состояния круглой пластинки, формируемого неосесимметричными температурными воздействиями. Задача рассмотрена в упругопластической постановке. Теплофизические характеристики материала принимались постоянными. Расчеты воспроизводят и позволяют объяснить влияние теплового воздействия, как основной части технологического процесса сварки, на искажение проектной формы пластинки

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=664>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=664>

### PHYSICOMATHEMATICAL MODEL OF THE UNSTEADY THERMOELASTIC FIELD OF A ROUND PLATE GENERATED BY NONAXISYMMETRIC ACTION OF THE TEMPERATURE

Roslyakova I.S.  
The Bauman Moscow State Technical University

The paper presents the calculation and the analysis of the stress-strain state of a round plate generated by nonaxisymmetric action of the temperature. The problem is considered in the elastoplastic formulation. The thermal parameters of the material are assumed to be constant. The calculations reproduce and make it possible to explain the effect of the thermal action, being the basic part of the engineering process of welding, on the deformation of the design shape of the plate

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=664](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=664)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=664](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=664)

### ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ СПУТНИКА ЮПИТЕРА АНАНКЕ

Островский Н.В.  
Вятский государственный университет

В Солнечной системе существует ряд явлений, которые не могут быть описаны с использованием уравнения всемирного тяготения Ньютона, которое строго соответствует лишь гравитационному взаимодействию двух тел. С его использованием нельзя, например, объяснить движение Луны вокруг Земли, поскольку Луна находится в сфере тяготения Солнца. Сходная ситуация имеется и в случае внешних спутников Юпитера – Пасифе, Синопе, Карме и Анаке. В данной работе использовано предложенное автором оригинальное обобщенное уравнение гравитационного взаимодействия для построения физической и на его основе математической модели орбитального движения спутника Юпитера Анаке

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=960>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=960>

### PHYSICAL MODEL OF MOVEMENT OF JUPITER SATELLITE ANANKE

Ostrovskiy N.V.  
Vyatka State University

In Solar system exists some phenomena's, which can be not described with use of the Newton equation of world-wide gravity Newton, which strictly corresponds to gravitational interaction of two body only. With its use it is impossible to explain, for example, moving the Moon around Land since Moon inheres in sphere of Sun gravity. Cognate situation there is in the event of external satellites of Jupiter - Pasphe, Sinope, Karne and Ananke. In given work is used offered by author original generalised equation of gravitational interactions for building physical and on its base - mathematical model of the orbital moving of Jupiter satellite - Ananke

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=960](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=960)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=960](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=960)



**ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ  
ВОДОРОДА****Островский Н.В.**

Вятский государственный университет

С использованием усовершенствованной модели строения атома Бора, включающей оригинальное обобщённое уравнение электростатического взаимодействия, построена динамическая модель молекулярного иона водорода, который представляет собой атом водорода, вокруг которого вращается второе ядро. Кроме того, в модели используется величина внутренней энергии электрона, которая определяется деформацией его орбиты под действием ядра 2. Вычисленный в рамках данной модели потенциал ионизации отличается от экспериментального на 1,4% отн

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=961>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=961>

**DYNAMICAL MODEL OF THE HYDROGEN  
MOLECULE****Ostrovskiy N.V.**

Vyatka State University

With use of the advanced Bohr's model of atom structure, including the original generalized equation of electrostatic interaction, the dynamic model of the hydrogen molecular ion is constructed, in which the nucleus 2 moves around hydrogen atom. Besides, in models is used the value of internal energy of electron, which the deformation of its orbit under the action of nucleus 2 is determined. The ionization potential of H<sub>2</sub><sup>+</sup>, calculated in framework of this model, differs from experimental on 1,4% relatively

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=961](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=961)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=961](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=961)

**АНАЛИЗ КОЛЕБАНИЙ КРУПНЫХ МОЛЕКУЛ С  
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ РАНЕЕ  
ИССЛЕДОВАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ В  
КАЧЕСТВЕ БАЗИСА****Дементьев В.А.**Институт геохимии и аналитической химии  
им.В.И.Вернадского РАН

Предлагается в ряде задач использовать всю доступную информацию о колебательных состояниях ранее исследованных фрагментов, вплоть до колебательных волновых функций фрагментов. Описана техника формирования полной колебательной функции крупной молекулярной системы в форме линейной комбинации базисных функций. В качестве базиса используются готовые колебательные функции фрагментов исследуемого соединения

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=963>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=963>

**ANALYSIS OF VIBRATIONS OF LARGE MOLECULES  
USING WAVE FUNCTIONS OF PREVIOUSLY STUDIED  
MOLECULAR SYSTEMS AS A BASIS****Dementiev V.A.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical  
Chemistry of Russian Academy of Sciences

It is proposed to use all accessible information on vibrational states of previously studied molecular fragments, wave functions to be included, in the certain tasks of molecular theory. The technique of construction of the whole vibrational wave function for a large molecular system as a linear combination of functions from basis set, using wave functions of previously studied molecular systems as a basis

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=963](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=963)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=963](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=963)

**О ПЕРЕНОСИМОСТИ И УСТОЧИВОСТИ СИСТЕМ  
ПАРАМЕТРОВ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА  
МОДЕЛИРОВАНИЯ ВИБРОННЫХ СПЕКТРОВ И  
СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ В ВОЗБУЖДЕННЫХ  
СОСТОЯНИЯХ****Баранов В.И., Соловьев А.Н.**Институт геохимии и аналитической химии  
им.В.И.Вернадского РАН

Параметрическим методом теории вибронных спектров для моделей 1-го и 2-го приближений вычислены структуры вибронных спектров ряда незамещенных молекул линейной и полициклической структуры и с различными заместителями. Определены величины параметров второго приближения метода. Согласие с экспериментом таково, что переход к приближениям более высокого уровня точности не требуется. Исследованы свойства параметров, в частности их переносимость и возможность проведения предсказательных расчетов сложных соединений, включающих фрагменты разного типа

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=531>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=531>

**ON STABILITY AND TRANSFERABILITY OF  
PARAMETERS SET IN PARAMETRIC SYSTEMS FOR  
THE MODELING OF VIBRONIC SPECTRA AND OF  
STRUCTURE OF MOLECULES IN EXCITED STATES****Baranov V.I., Solovyev A.N.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical  
Chemistry of Russian Academy of Sciences

Structures of vibronic spectra were calculated for a number of linear and polycyclic molecules (both unsubstituted and bearing various substituents) with the aid of parametric method of vibronic spectra theory in the first and second approximation. Values of parameters for a second approximation method were determined. Agreement with experimental data was sufficient to avoid approximations of higher levels. Properties of parameters, in particular their transferability, as well as a possibility of predictive calculations for complex molecules comprising fragments of various types were studied

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=531](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=531)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=531](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=531)

**ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПРИРОДНЫХ  
ОБЪЕКТОВ НА ОСНОВЕ МОДЕЛЬНЫХ  
СООТНОШЕНИЙ САМОПОДОБИЯ**

**Крутов А.В., Лабузов А.С., Мухоедов Д.С., Тасенко  
В.И., Семенюта Д.В., Глазков А.Н.**  
Елецкий государственный университет

Исследование свойств небесных объектов всегда было актуальной задачей, особенно в связи с выявлением и изучением общеприродных закономерностей

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=534>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=534>

**ЛИШНИЕ ЭЛЕКТРОНЫ НАНОМАТЕРИАЛОВ.  
НОВЫЙ ПОДХОД К ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМУ  
КОСТРУИРОВАНИЮ**

**Шека Е.Ф.**

Российский университет дружбы народов

Доклад суммирует первые результаты нового подхода к вычислительному конструированию наноматериалов, обусловленному наличию в них лишних электронов. Введенный термин означает существование разности между числом валентных электронов атомов, составляющих нанообъект, и числом образуемых ими химических связей. Эта ситуация столь часто встречается в наноматериалах, что лишние электроны должны рассматриваться как характерная особенность наноматериалов, дополняя список их основных характеристик наряду с размером, формой и условиями на поверхности. Предлагаемый новый подход заключается в установлении количественных соотношений структура-свойства (QSAR) с учетом поведения лишних электронов, что открывает новые возможности предсказания и конструирования наноматериалов с заданными свойствами

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=658>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=658>

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА  
ОТНОСИТЕЛЬНОЙ СТАБИЛЬНОСТИ  
ОКСОНИЕВЫХ ИОНОВ 4-ФЕНИЛ-1,3-ДИОКСАНА**

**Кузнецов В.В., Курамшина А.Е.**

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Компьютерное моделирование конформационных превращений оксониевых ионов 4-фенил-1,3-диоксана показало, что поверхность потенциальной энергии содержит 12 возможных конформеров. Результаты квантово-химических расчетов (AM1, RHF//STO-3G) свидетельствуют о преобладании формы кресла с экваториальной фенильной группой и аксиальной ориентацией протона у атома O-3

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=968>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=968>

**STUDY OF THE PROPERTIES OF NATURAL  
OBJECTS ON THE BASIS OF THE MODEL SELF-  
SIMILARITY RELATIONS**

**Krutov A.V., Labuzov A.S., Muhoedov D.S., Tsenko  
V.I., Semenyuta D.V., Glazkov A.N.**  
Yelets State University

The study of the properties of celestial objects was always a topical problem, particularly, in connection with the establishment and the investigation of the general laws of the nature

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=534](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=534)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=534](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=534)

**ODD ELECTRONS IN NANOMATERIAL SCIENCES. A  
NEW APPROACH TO COMPUTATIONAL CHEMICAL  
ENGINEERING**

**Sheka E.F.**

Peoples' Friendship University of Russia

The paper presents first results concerning a peculiar aspect of nanomaterial science caused by odd electrons. The term stands from the difference between the number of atom valence electrons and that one of the neighboring atoms coupled to the considered one. The situation is so frequently met for nanomaterials that odd electrons should be added to size, shape, and surface conditions as one of the main characteristics of nanomaterials. Suggested Quantitative-Structure-Activity-Relationship (QSAR) approach accumulates these characteristics and shows the way of the prediction of the behavior of nanomaterials

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=658](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=658)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=658](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=658)

**QUANTUM-CHEMICAL ESTIMATION OF THE  
RELATIVE STABILITY OF 4-PHENYL-1,3-DIOXAN  
OXONIUM IONS**

**Kuznetsov V.V., Kuramshina A.E.**

Ufa State Technical Oil University

Computational approach to the conformational study of 4-phenyl-1,3-dioxan oxonium ions led to the conclusion that potential energy surface contains 12 possible conformers. According to the result of quantum-chemical calculations (AM1, RHF//STO-3G) the more stable among them is chair-form with equatorial phenyl group and axial proton near atom O-3

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=968](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=968)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=968](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=968)

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ ГРУППАМИ В АМИНОКИСЛОТАХ

Клюев С.А.  
Научный центр

Рассмотрено взаимодействие между (+)H<sub>3</sub>N- и (-)OOC- группами в аминокислотах. Типы структур были следующими: (+)H<sub>3</sub>NCH(X)COO(-), (+)H<sub>3</sub>NCH(X)CH<sub>2</sub>COO(-) и (+)H<sub>3</sub>NCH(X)CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COO(-) (X-атом или группа атомов). Параметры H-связи (-COO(-)... (+)H<sub>3</sub>N-) рассчитаны методами PM3 и AM1

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=527>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=527>

### MODELING OF INTERACTION BETWEEN FUNCTIONAL GROUPS IN AMINO ACIDS

Klyuev S.A.  
Scientific centre

Interaction between (+)H<sub>3</sub>N- and (-)OOC- groups in amino acids was considered. Types of structures were as follow: (+)H<sub>3</sub>NCH(X)COO(-), (+)H<sub>3</sub>NCH(X)CH<sub>2</sub>COO(-) and (+)H<sub>3</sub>NCH(X)CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COO(-) (X-atom or groups of atoms). Parameters of H-bond (-COO(-) ... (+)H<sub>3</sub>N-) were calculated by PM3 and AM1 methods

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=527](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=527)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=527](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=527)

### AB INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ ТАУТОМЕРНОЙ ИЗОМЕРИИ ГОССИПОЛА

Дмитрук А.Ф., Рыбаченко В.И., Чотий К.Ю.,  
Илькевич Н.С., Заречная О.М.

Институт физико-органической химии и углехимии им.  
Л.М.Литвиненко НАН Украины

Представлены результаты исследования таутомерной изомерии молекулы госсипола (1,1',6,6',7,7'-гексагидрокси-5,5'-диизопропил-3,3'-диметил-2,2'-бинафтил-8,8'-дикарбоксальдегида), который является биологически активным веществом растительного происхождения, в зависимости от растворителя. Установлено, что в ДМСО госсипол присутствует в основном в лактольной форме, а в хлороформе в альдегидной

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=524>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=524>

### AN AB INITIO STUDY OF TAUTOMERISM IN GOSSYPOL

Dmitruk A.F., Rybachenko V.I., Chotiy K.Yu., Ilkevich N.S., Zarechnaya O.M.

L.M.Litvinenko Institute of Physical-Organic & Coal  
Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine

Results of studies on tautomerism of gossypol in various solvents are presented. Gossypol (1,1',6,6',7,7'-hexahydroxy-5,5'-diisopropyl-3,3'-dimethyl-2,2'-binaphthyl-8,8'-dicarbaldehyde) is a biologically active substance of plant origin. It was found that in DMSO a lactole form of gossypol is present, while in chloroform largely an aldehyde form exists

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=524](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=524)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=524](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=524)

### ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ЗАТУХАЮЩИЕ КОЛЕБАНИЯ СТАТИЧЕСКИ ИЗОГНУТОГО ТРУБОПРОВОДА

Хакимов А.Г.

Институт механики уфимского научного центра РАН

Исследуются нелинейные затухающие пространственные колебания статически изогнутого двухопорного трубопровода с рабочей средой. В статическом состоянии труба изогнута под действием собственного веса. Предполагается, что она выводится из этого состояния путем отклонения на угол от вертикальной плоскости. Коэффициент упругости опор и деформации трубы, связанные с ее выходом из плоскости изгиба, считаются малыми, поэтому изогнутая ось трубопровода является плоской кривой. Изгибные колебания рассматриваются по главной форме в плоскости трубы. Численное решение задачи Коши определялось методом Рунге – Кутта. Учет силы инерции Кориолиса приводит к увеличению частоты свободных колебаний и уменьшению угла поворота трубы на 10 % и максимального прогиба трубы в плоскости изгиба на 20 %. Учет сил сопротивления приводит к уменьшению амплитуды и увеличению периода затухающих колебаний

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=966>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=966>

### SPATIAL DAMPED OSCILLATIONS OF A STATICALLY BENT PIPELINE

Khakimov A.G.

Institute of Mechanics of the Ufa Branch of Russian  
Academy of Sciences

The nonlinear damped spatial oscillations of a statically bent double-seat pipeline filled with a working medium are studied. In the static state the pipe is bent under its own weight. It is assumed that it is removed from this state by deflecting it from the vertical plane through an angle.... The elasticity coefficient of the supports and the deformation coefficient of the pipe controlling the pipe departure from the plane of bending are assumed to be small; therefore, the curved pipeline axis is a two-dimensional curve. The bend oscillations of the basic form are considered in the pipe plane. The numerical solution of the Cauchy problem is determined by the Runge-Kutta method. Taking the Coriolis force of inertia into account leads to an increase in the frequency of the free oscillations and a decrease in the pipe turn angle by 10% and the maximum pipe deflection in the plane of bending by 20%. Taking resistance forces into account leads to a decrease in the amplitude and an increase in the period of the damped oscillations

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=966](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=966)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=966](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=966)

**ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ МИНЕРАЛЬНЫХ СОЛЕЙ НА  
УРОВЕНЬ БАКТЕРИАЛЬНОЙ  
БИОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ: ПОСТРОЕНИЕ  
РЕГРЕССИОННОЙ МОДЕЛИ В УСЛОВИЯХ  
МУЛЬТИКОЛЛИНЕАРНОСТИ**

**Алешина Е.С.**

Оренбургский государственный университет

При исследовании ионного состава минеральных солей на уровень бактериальной биолюминесценции установлены множественные корреляционные взаимосвязи между анализируемыми параметрами, свидетельствующие о наличии мультиколлениарности. Устранение мультиколлениарности позволило существенно упростить регрессионную зависимость, продемонстрировав значимость присутствия только ионов  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$  и  $\text{HCO}_3^-$ , определяющих 65% вариаций бактериальной биолюминесценции

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=657>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=657>

**ESTIMATION OF MINERAL SALTS INFLUENCE ON A  
BACTERIAL BIOLUMINESCENCE LEVEL:  
REGRESSION MODEL CONSTRUCTION IN  
CONDITIONS OF MULTI-COLLINEARITY**

**Aleshina E.S.**

Orenburg State University

Atresearch of mineral salts ionic structure influence on a bacterial bioluminescence level plural correletion interrelations between the analyzed parameters, testifying about presence multi-collinearity are established. Elimination of multi-collinearity has allowed to simplify a regression dependence, having shown the importance of presence only ions  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$  and  $\text{HCO}_3^-$ , defining 65% of bacterial bioluminescence variations

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=657](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=657)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=657](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=657)

**ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛЬНОЕ  
ПРЕДСТАВЛЕНИЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О  
ДВИЖЕНИИ В ПОЛЕ ЦЕНТРАЛЬНЫХ СИЛ ПО  
ГИПЕРБОЛЕ КАК АНАЛОГА ЗАДАЧИ КЕПЛЕРА**

**Крутов А.В., Лабuzов А.С., Тасенко В.И., Мухоедов  
Д.С., Семенюта Д.В., Глазков А.Н.**

Елецкий государственный университет

Обсуждаются геометрические аспекты задач небесной механики, построены геометрические модели задач, на основе которых предложены аналоги законов Кеплера при движении по коническим сечению – гиперболе; представлена геометрическая интерпретация этих движений; вводится понятие гиперболической аномалии

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=533>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=533>

**GEOMETRIC MODEL REPRESENTATION OF THE  
SOLUTION OF THE MOTION IN A HYPERBOLA IN  
THE CENTRAL FORCE FIELD AS A COUNTERPART  
OF THE KEPLER PROBLEM**

**Krutov A.V., Labuzov A.S., Tassenko V.I., Muhoedov  
D.S., Semenyuta D.V., Glazkov A.N.**

Yelets State University

The geometric aspects of the celestial mechanics problems are discussed; the geometric models of the problems, on the basis of which the counterparts of the Kepler laws for the motion in a conical section (hyperbola) are proposed, are constructed; the geometric interpretation of these motions is given; and the notion of hyperbolic anomaly is introduced

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=533](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=533)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=533](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=533)

## СЕКЦИЯ 4

## ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

## SECTION 4

## VISUALIZATION IN SCIENTIFIC RESEARCHES

**КОРРЕКЦИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ РАССТРОЙСТВ  
МЕТОДОМ ДВОЙНОЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ ОТ ЭЭГ  
ОСЦИЛЛЯТОРОВ ПАЦИЕНТА****Федотчев А.И.**

Институт биофизики клетки РАН

Разработан и экспериментально протестирован перспективный подход к коррекции функциональных нарушений у человека, основанный на двойной обратной связи от собственных биоэлектрических процессов мозга пациента. Подход предполагает двойное использование характерных для каждого пациента узкочастотных ЭЭГ осцилляторов – в качестве осознанно регулируемого параметра (с помощью сенсорных сигналов обратной связи) и в качестве фактора, автоматически модулирующего параметры лечебной стимуляции. Дано научное обоснование подхода, представлены результаты его экспериментального тестирования, намечены перспективы его дальнейшего развития

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=967>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=967>

**CORRECTION OF HUMAN FUNCTIONAL  
DISTURBANCES BY THE METHOD OF DOUBLE  
FEEDBACK FROM PATIENT'S EEG OSCILLATORS****Fedotchev A.I.**

Institute of Cell Biophysics of Russian Academy of Sciences

New approach to non-drug correction of human functional disturbances based on double feedback from patient's own brain electrical activity is developed and experimentally tested. The approach assumes two ways of utilization of patient's narrow-band EEG oscillators. In the first one, these oscillators are utilized as voluntary regulated parameter (via sensory feedback signals). In the second one, these oscillators are used simultaneously for automatic modulation of resonant stimulation. Scientific basis of the approach is provided, the results of its experimental testing are presented, the most promising ways of further approach development are delineated

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=967](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=967)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=967](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=967)

**ТРАНС-1,3-БУТАДИЕН И ЕГО ИЗОТОПОМЕРЫ:  
КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ И  
МАСШТАБИРОВАННЫЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ  
СИЛОВЫЕ ПОЛЯ****Панченко Ю.Н., Маккин Д.К., Крейг Н.К.**Московский государственный университет  
им.М.В.Ломоносова

Определены квадратичные квантово-химические силовые поля транс-1,3-бутадиена методами MP2 и B3LYP с базисными наборами 6-311++G\*\*, cc-pVTZ и aug-cc-pVTZ. Масштабирующие множители найдены с использованием экспериментальных волновых чисел 11 изотопомеров. Экспериментальные данные по волновым числам тщательно проанализированы для всех изотопомеров. Предложены некоторые переотнесения и выполнен анализ вкладов резонанса Ферми. Рассчитаны постоянные центробежного искажения

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=965>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=965>

**S-TRANS-1,3-BUTADIENE AND ITS ISOTOPOMERS:  
VIBRATIONAL SPECTRA AND SCALED QUANTUM-  
CHEMICAL FORCE FIELDS****Panchenko Y.N., McKean D.C., Craig N.C.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

Quadratic quantum-chemical force fields have been determined for s-trans-1,3-butadiene using MP2 and B3LYP methods and including the 6-311++G\*\*, cc-pVTZ, and aug-cc-pVTZ basis sets. Scaling factors were obtained utilizing the experimental wavenumbers for up to 11 isotopomers. Existing experimental data for all isotopomers were scrutinized. Some reassignments were suggested and analysis of the Fermi resonance contributions was performed. Centrifugal distortion constants have been calculated

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=965](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=965)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=965](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=965)

**AB INITIO КОЛЕБАТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ 3,3-ДИМЕТИЛ-1-(ТРИМЕТИЛПЛОУМБИЛ)ЦИКЛОПРОПЕНА**  
**Панченко Ю.Н., Де Марэ Дж.Р., Абраменков А.В.**  
 Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

**AB INITIO VIBRATIONAL ANALYSIS OF 3,3-DIMETHYL-1-(TRIMETHYLPLUMBYL)CYCLOPROPENE**  
**Panchenko Y.N., De Mare G.R., Abramenkov A.V.**  
 M.V.Lomonosov Moscow State University

Рассчитаны геометрические параметры и квантово-химические силовые поля для 1-(триметилX) производных 3,3-диметилциклопропена (X = C, Si, Ge, Sn, Pb) на уровне псевдопотенциалов (HF/SDDAll)

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=964>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=964>

The geometrical parameters and quantum-chemical force fields for 3,3-dimethylcyclopropene and its 1-(trimethylX) derivatives (X = C, Si, Ge, Sn, or Pb) were calculated at the pseudopotential (HF/SDDAll) level

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=964](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=964)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=964](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=964)

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТАУТОМЕРИИ ОСНОВАНИЙ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ В РАЗНЫХ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЯХ МЕТОДАМИ ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ**

**Тен Г.Н., Баранов В.И.**  
 Саратовский государственный университет

**STUDY OF TAUTOMERISM IN DIFFERENT PHASES OF NUCLEIC ACID BASES BY ELECTRONIC VIBRONIC SPECTROSCOPY**

**Ten G.N., Baranov V.I.**  
 Saratov State University

В данной работе исследуется возможность идентификации таутомерных форм оснований нуклеиновых кислот на основе анализа структурно-динамических моделей молекул в возбужденных электронных состояниях и электронно-колебательных спектров. Проведен анализ изменений структуры при электронном возбуждении Pur, Ade, Ura, Thy, а также расчёт электронно-колебательных спектров таутомерных форм Pur и Ade первых двух электронных переходов для разных фазовых состояний. Показано, что для определения таутомерной формы в данном фазовом состоянии необходимо выбирать те электронно-возбуждённые состояния, в которых структурно-динамические модели возбужденных состояний рассматриваемых таутомеров существенно различаются. Для таутомеров оснований нуклеиновых кислот это возможно уже начиная со второго возбуждённого состояния

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=609>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=609>

In the present study, the possibility to identify tautomeric forms of nucleic acid bases from the analysis of structural dynamic models of molecules in excited electronic states and of electronic vibronic spectra was investigated. Analysis of excited structures of Pur, Ade, Ura, Thy was accomplished. Electronic vibronic spectra of tautomeric forms of Pur and Ade for the two lowest-energy electron transitions in various phases were calculated. It has been demonstrated that excited electronic states with considerably different structural dynamic models should be selected for the studied tautomeric forms in order to allow the identification of a tautomeric form in the given phase. For tautomers of nucleic acid bases it was shown to be possible starting already from the second excited state

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=609](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=609)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=609](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=609)

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТАУТОМЕРИИ ОСНОВАНИЙ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ В РАЗНЫХ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЯХ МЕТОДАМИ ИК И РКР СПЕКТРОСКОПИИ**

**Тен Г.Н., Бурова Т.Г., Баранов В.И.**  
 Саратовский государственный университет

**STUDY OF TAUTOMERISM IN DIFFERENT PHASES OF NUCLEIC ACID BASES BY IR AND RAMAN SPECTROSCOPY**

**Ten G.N., Burova T.G., Baranov V.I.**  
 Saratov State University

В данной работе для определения таутомерных структур цитозина, пурина и тиозамещённых урацила использован комплексный подход, основанный на расчёте и анализе частот и интенсивностей ИК, КР и РКР спектров в разных фазовых состояниях. Проведенный расчёт позволил идентифицировать таутомерные формы исследуемых соединений в каждом фазовом состоянии

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=606>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=606>

In the present study tautomeric structures of cytosine, purine, and thiosubstituted uracil were determined with the aid of a complex approach that comprises calculations and analysis of frequencies and intensities in IR and Raman spectra in various phases. Calculations allowed the identification of tautomeric forms of molecules in question for each of phases

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=606](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=606)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=606](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=606)

**СЕКЦИЯ 5****ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ****SECTION 5****DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS****РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭРИТРОЦИТОВ СИНИЦ В  
РАЗНЫХ ЭКОУСЛОВИЯХ. ДОПОЛНЕНИЕ****Стариков В.Н., Скрылева К.А.**Мичуринский государственный педагогический  
институт**DISTRIBUTION OF RED CORPUSCLES OF GREAT -  
TIT IN VARIOUS ENVIRONMENTS. ADDITION****Starikov V.N., Skrileva K.A.**

Michurinsk State Pedagogical Institute

Распределение эритроцитов большой синицы (*Parus major*, Linnaeus) в зависимости от их большого и малого диаметров в разных экоусловиях на Тамбовщине моделировалось нормальным распределением  $N(\mu, \sigma)$ . Даны примеры такого применения нормального распределения (НР)  $N(\mu, \sigma)$  для описания результатов полевого и лабораторного мониторинга эритроцитов большой синицы (ЭБС), встречающейся на Тамбовщине. Эти примеры могут быть использованы статистиками, биометрами, экологами, зоологами и др. Мазки крови птиц на предметном стекле оптического микроскопа готовили по общепринятой методике. Использовался микроскоп Karl Zeiss Axioplan 2 Imaging со встроенной цифровой видеокамерой, подключенной к компьютеру, анализирувавшему изображение и измерявшему диаметры эритроцитов в мкм по программе Axio Vision, разработанной специально для микроскопа. В анализе использовано 84 выборки (42 для ВБД и 42 для ВМД, измеряемых одновременно) из птиц, обитавших при разных температурах воздуха ( $-25^{\circ}\text{C}$ ,  $-15^{\circ}\text{C}$ ,  $-10^{\circ}\text{C}$ ,  $0^{\circ}\text{C}$ ,  $10^{\circ}\text{C}$ ,  $20^{\circ}\text{C}$ ,  $30^{\circ}\text{C}$ ) в разных ареалах и районах Тамбовщины (рабочий поселок, сады биостанции МГПИ, ВНИИГ и СПР в окрестностях г. Мичуринска и Первомайский р-н) с обработкой и без обработки деревьев ядохимикатами. Число объектов-эритроцитов в каждой выборке колебалось от 30 до 54. По критерию хи-квадрат теоретическое нормальное распределение (НР) описывает наибольшую часть опытных распределений ЭБС по ВБД (величине большого диаметра) и ВМД (величине малого диаметра). Незначительная часть выборок не описывается с помощью НР, что может быть объяснено их нерепрезентативностью

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=528>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=528>

Distribution of red corpuscles of great-tit (*Parus major*, Linnaeus) as a function of large and small diameters in various environments of Tambov region are modeling by normal distribution  $N(\mu, \sigma)$ . This examples can be useful fo statisticians biometricians, ecologists, zoologists etc. Samples of blood on preparating glass of optic microscope is prepared as following to common technique. It is used Microscope .Karl Zeiss Axioplan 2 Imaging. with digital camera connected with computer. Computer analysed a image and measured a diameters of red corpuscles (in microns) with program .Axio Vision. written specially for microscope. It used 84 tit-blood-samples dimension from 30 to 54 red corpuscles for birds living in various regions for different environment-temperatures. Theoretic normal distribution (TNR) approximate largest part of observed distributions (OD) of red corpuscles of great tit (RCOGT) as a function of large diameter (LD) and small diameter (SD) in accordance chi-squared test goodness-of-fit. TNR no approximate smallest part of observed distributions (OD) of red corpuscles of great tit (RCOGT) as a function of large diameter (LD) and small diameter (SD). This part seems to be an unrepresentative samples

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=528](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=528)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=528](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=528)

## СЕКЦИЯ 6

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ (ПРИНЯТИЕ РЕШЕНИЙ,  
ЭКСПЕРТНЫЕ СИСТЕМЫ И Т.Д.)

## SECTION 6

INTELLIGENCE SYSTEMS AND TECHNOLOGIES (DECISION-MAKING, EXPERT  
SYSTEM ETC.)ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ  
МОДЕЛЕЙ УПРАВЛЕНИЯ КАСКАДАМИ  
ВОДОХРАНИЛИЩ

Антонов А.А.

Московский государственный институт радиотехники,  
электроники и автоматики (ТУ)

В докладе рассматриваются вопросы создания программно-инструментального комплекса для исследования моделей управления каскадом водохранилищ. Особенное внимание уделяется такой важной функциональной составляющей, как построение гидрологических рядов исходной ситуации. Описывается предложенная автором обобщенная модель гидрологических рядов. Приводится методика построения гидрологических рядов на основе прогноза и библиотеки реальной боковой приточности за многолетний период. Описывается генератор моделей гидрологических рядов, реализующий предложенную методику

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=1115>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=1115>

APPLICATION SUITE FOR RESEARCH OF  
RESERVOIRS CASCADE MANAGEMENT MODELS

Antonov A.A.

Moscow State Institute of Radio Engineering, Electronics,  
Engineering and Automatics

In this work issues of designing a software toolkit for research of reservoirs cascade management models are covered. Emphasis is put on such important function as generation of hydrologic series for an initial situation. Generalized model of hydrologic series offered by the author is described. Method of hydrologic series generation based on forecast and a library of long-term side inflow survey data is given. Generator of hydrologic series models realizing given method is described

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1115](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1115)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1115](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1115)

## О GPS-НАВИГАЦИИ

Стариков В.Н., Исаченков Ф.Н.

Мичуринский государственный педагогический  
институт

Есть классическая задача (разностно-дальномерный метод) нахождения неизвестных декартовых координат  $x, y, z$  в известный момент времени  $t$  около- или наземной цели по известным 4 или 5 спутниковым декартовым координатам  $x_i, y_i, z_i$ ,  $i=1,2,3,4,5$  в тот же момент  $t$  или в близкий момент  $t+dt$  или по измеренным дальностям их до цели  $r_i = \sqrt{(x_i - x)^2 + (y_i - y)^2 + (z_i - z)^2}$ ,  $i=1,2,3,4,5$ .

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=665>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=665>

## ON GPS- NAVIGATION

Starikov V.N., Isachenkov F.N.

Michurinsk State Pedagogical Institute

It is classic problem (the different-distance-method) for determination of unknown Cartesian object-coordinates  $x, y, z$  in known instant  $t$  of earthly objects using known Cartesian 4 or 5 satellite-coordinates  $x_i, y_i, z_i$ ,  $i=1,2,3,4,5$  in the same time  $t$  or their measured object-distances  $r_i = \sqrt{(x_i - x)^2 + (y_i - y)^2 + (z_i - z)^2}$ ,  $i=1,2,3,4,5$ .

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=665](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=665)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=665](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=665)



## СЕКЦИЯ 7

### ОПТИМАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ, ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

## SECTION 7

### OPTIMUM PROCEDURES AND DESIGN OF EXPERIMENTS

#### О ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ ВОЗМОЖНОСТЯХ В АЛГОРИТМАХ ПЛП-ПОИСКА ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Статников И.Н., Фирсов Г.И.

Институт машиноведения им. А.А.Благонравова РАН

В докладе показаны дополнительные алгоритмические свойства ПЛП-поиска при проведении вычислительных экспериментов, состоящие в том, что при проведении планируемого вычислительного эксперимента стало возможным учитывать точно значения границ интервалов варьирования или приблизиться к ним как изнутри, так и извне на величину  $E \ll 1$ . При этом оказывается приемлемым общее число вычислительных экспериментов, и практически не меняются первые и вторые моменты новой и старой матрицы планирования экспериментов

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=959>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=959>

#### ON THE ADDITIONAL POSSIBILITIES IN THE ALGORITHMS OF PLP- SEARCH WHILE CONDUCTING OF THE COMPUTATIONAL EXPERIMENTS

Statnikov I.N., Firsov G.I.

A.A. Blagonravov Mechanical Engineering Research  
Institute of Russian Academy of Sciences

In the report are shown the additional algorithmic properties of PLP- search while conducting of computational experiments, consisting in the fact that while conducting of the planned computational experiment became possible to consider accurately the values of the boundaries of the intervals of variation or to approach them both from within and from without to the value of  $E \ll 1$ . In this case the total number of computational experiments proves to be acceptable, and the first and second moments of the new and old matrix of planning experiments practically do not change

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=959](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=959)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=959](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=959)

#### ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ В ТЕОРИИ РЕЗАНИЯ

Смирнов В.В.

Бийский технологический институт

Реальные процессы механической обработки сложны и разнообразны. Поэтому отдельная разрабатываемая численная модель не может быть применена ко всем контактирующим материалам и условиям резания. В настоящее время прилагаются усилия для уточнения и интенсификации соответствующих численных алгоритмов. Особое внимание уделяется методам граничных интегральных уравнений и методу конечных элементов в эйлеровой или лагранжевой формулировке

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=659>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=659>

#### COMPUTING EXPERIMENT IN THE CUTTING THEORY

Smirnov V.V.

Biysk Tehnological Institute

Real processes of machining are complex and various. The separate numerical model being developed cannot therefore be applied to all contacting materials and conditions of cutting. Now efforts for specification and intensification of corresponding numerical algorithms are being taken. The special attention is given to the boundary integrated equations methods and the method of finite elements in Eulerian or Lagrangian techniques

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=659](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=659)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=659](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=659)

**СЕКЦИЯ 8****ДОКЛАДЫ, НЕ ВОШЕДШИЕ В ОСНОВНЫЕ СЕКЦИИ****SECTION 8****THE REPORTS, WHICH ARE NOT INCLUDED IN THE BASIC SECTIONS****КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ  
СУЛЬФАНИЛАМИДНЫХ ПРЕПАРАТОВ****Зауэр Е.А.**Волгоградский государственный технический  
университет**QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONS OF  
SULFONAMIDE DRUGS****Sauer E.A.**

Volgograd State Technical University

Энтальпия образования является фундаментальной физико-химической характеристикой соединения. Для ее определения в последнее время широко привлекаются различные квантово-химические методы.

В данной работе с помощью полуэмпирических квантово-химических методов PM3, MNDO, MINDO/3 и AM1, входящих в программный пакет MOPAC 7.21, рассчитаны теплоты образования семнадцати из основных известных и рекомендованных к применению сульфаниламидных препаратов. Наиболее близки между собой результаты расчетов, выполненных методами PM3 и AM1

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=530>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=530>

Heat of formations is the fundamental physical and chemical characteristic of connection. For its definition various quantum chemical methods recently are widely involved. In the given work by means of semi-empirical quantum chemical methods PM3, MNDO, MINDO/3 and AM1, entering into software package MOPAC 7.21, heats of formation of seventeen of the basic known and recommended to application sulfanilamide preparations are calculated. Results of the calculations executed by methods PM3 and AM1 are closest among themselves

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=530](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=530)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=530](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=530)

**ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ЧАСТИЧНОГО  
ОТКРЫВАНИЯ ТОРЦОВ УГЛЕРОДНЫХ  
НАНОТРУБОК****Свечников А.Б.**

Российский научный центр "Курчатовский Институт"

**STUDY OF THE PARTIAL OPENING PROCESS OF  
CAPPED CNT****Svechnikov A.B.**

The Russian Research Centre Kurchatov Institute

Процесс частичного открывания торцов углеродных нанотрубок (6,0) исследовался методом молекулярной динамики и неэмпирическими квантово-химическими расчётами. Как следует из представленных результатов, атомы никеля, в отличие от атомов углерода, оказывают существенное влияние на процесс открывания торцов УНТ. Вызванное присутствием атомов никеля понижение величины энергетического барьера более чем в 4 раза, может оказывать существенное влияние на кинетику роста УНТ

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=663>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=663>

The process of the partial opening of capped CNT (6,0) has been studied with the method of molecular dynamics and ab initio quantum chemical calculations. It was shown that nickel atoms, unlike carbon atoms, could strongly effect on the process of the partial opening of capped CNT. Their presence at the CNT edge could decrease the activation energy barrier of the process by a factor of 4, and could play important role in CNT growth kinetics

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=663](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=663)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=663](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=663)

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ ОСНОВА ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ  
НЕОДНОРОДНОСТИ Y-ХРОМОСОМЫ ЧЕЛОВЕКА****Гришаева Т.М., Дадашев С.Я., Богданов Ю.Ф.**  
Институт общей генетики им.Н.И.Вавилова РАН

Исследовано распределение по Y-хромосоме человека разных классов повторяющихся последовательностей (ПП), активных в мейозе. Выявлено, что повторы Alu (SINE) и MaLR (LINE), в частности, AluSx, AluSg и AluSq, с большей частотой встречаются в тех районах Y-хромосомы, которые принимают участие в синапсисе и рекомбинации. AluJb, а также L1 (LINE), напротив, расположены более равномерно. Это может свидетельствовать о разной роли этих ПП в мейотических процессах

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=529>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=529>

**MOLECULAR BASIS FOR FUNCTIONAL  
NONUNIFORMITY OF HUMAN Y CHROMOSOME****Grishaeva T.M., Dadashev S.Ya., Bogdanov Yu.F.**  
V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian  
Academy of Sciences

The distribution in human Y chromosome of different classes of repeated sequences (RS) active in meiosis was investigated. It has been found that Alu (SINE) and MaLR (LINE) repeats (in particular, AluSx, AluSg, and AluSq) more frequently occur in those Y-chromosome regions which are involved in synapsis and recombination. On the contrary, AluJb, as well as L1 (LINE), are distributed more uniformly. This can suggest different roles of these RS in meiotic processes

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=529](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=529)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=529](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=529)

# **5-я ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ "МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ"**



**18-20 АПРЕЛЯ 2007 г.**

**г. МОСКВА**

## **Организаторы**

Институт Геохимии и Аналитической Химии им. Вернадского В.И.  
Российской Академии Наук

Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова

<http://www.geokhi.ru>

**CONFORMATIONAL STUDY OF THE SCHISTOSTATIN-5 NEUROPEPTIDE**

Veliyeva L.I.

Бакинский государственный университет

The spatial organization and conformational properties of the schistostatin-5 neuropeptide shown C-terminal amino acid sequence similarity to cockroach and cricket allatostatins and to blowfly callatostatins have been investigated by the method of molecular mechanics

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=650>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=650>

**QSAR АНАЛИЗ АНТИГЕРПЕТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИМПЛЕКСНОГО МЕТОДА**

Хромов А.И., Муратов Е.Н., Артеменко А.Г., Волинецкая И.Л., Шмидтке М., Макаров В.А., Рябова О.Б., Вьюцлер П.

Физико-химический институт НАН Украины

В настоящей работе был использован метод QSAR на основе симплексного представления молекулярной структуры для поиска связи между структурой производных N,N'-(бис-5-нитропиримидил)-диспиротрипиперазина и 2-амино-3-нитропиразол[1,5-a]пиримидина и их 1) антивирусной активностью по отношению к вирусу простого герпеса HSV-1, штамм Купка; 2) цитотоксичностью на GMK-клетках; 3) индексом селективности (отношение цитотоксичности к антивирусной активности)

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=616>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=616>

**QSAR АНАЛИЗ ЛИГАНДОВ СЕРТОНИНОВЫХ РЕЦЕПТОРОВ МЕТОДОМ ДЕРЕВЬЕВ КЛАССИФИКАЦИЙ. НОВЫЙ ПОДХОД В ИНТЕРПРЕТАЦИИ МОДЕЛЕЙ КЛАССИФИКАЦИОННЫХ ДЕРЕВЬЕВ**

Полищук П.Г., Кузьмин В.Е., Артеменко А.Г., Хромов А.И.

Физико-химический институт НАН Украины

Поиск новых высокоаффинных лигандов серотониновых рецепторов 1A подтипа (5-HT<sub>1A</sub>) остается одной из важных задач медицинской химии. Именно эти соединения позволят повысить эффективность лечения депрессий, состояний тревоги и страха, неврозов и других нервных расстройств. Применение методов и подходов QSAR дают возможность проведения более целенаправленного поиска новых соединений.

Предлагаемый подход был апробирован на решении задачи «структура-аффинитет» для ряда производных арилпиперазина. Полученные данные находились в тесном соответствии с более ранними результатами, полученными методом частичных наименьших квадратов, что свидетельствует о его надежности и эффективности. Так, было обнаружено, что наиболее благоприятными для проявления аффинитета являются фрагменты фталимида, диэтилбарбитуровых кислот, хлорфенила (наиболее предпочтителен п хлорфенил) и метиленовая цепочка из шести атомов углерода

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=631>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=631>

**QSAR АНАЛИЗ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ КОМПЛЕКСОВ РЗЭ РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2-ОКСО-4-ГИДРОКСИХИНОЛИН-3-КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ НА ОСНОВЕ ИНФОРМАЦИОННО-СИМПЛЕКСНОГО ПОДХОДА**

Огниченко Л.Н., Кузьмин В.Е., Артеменко А.Г., Антонович В.П., Егорова А.В., Александрова Д.И.

Физико-химический институт НАН Украины

В настоящей работе продемонстрирована эффективность симплексного описания молекул на основе атомных информационных потенциалов для анализа влияния структуры производных 2-оксо-4-гидроксихинолин-3-карбоновой кислоты на время жизни и квантовый выход люминесценции комплексов ионов Eu (III) и Tb (III). Выявлены структурные фрагменты молекул, которые способствуют и препятствуют повышению времени жизни и квантового выхода люминесценции комплексов

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=622>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=622>

**QSAR АНАЛИЗ НА ОСНОВЕ ЦИРКУЛЯРНЫХ МОДЕЛЕЙ МОЛЕКУЛ. ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ 1,4-БЕНЗДИАЗЕПИНОВ НА ИХ АФФИНИТЕТ**

Ляховский А.В., Кузьмин В.Е., Артеменко А.Г., Ткачук Н.А., Макан С.Ю.  
Физико-химический институт НАН Украины

Методология решения задач структура-свойства основана на сравнительном анализе структур соединений, целевые свойства которых известны. Был разработан подход, суть которого заключается в моделировании молекул произвольной структуры в виде псевдоцикла, построение которого осуществляется модифицированным методом ветвей и грани  
<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=600>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=600>

**АКТИВАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ CF<sub>3</sub>-РОТОРА, ЗАТОРМОЖЕННОГО NO<sub>2</sub>-ГРУППОЙ В АНИОН-РАДИКАЛЕ ПАРА(БИС)ТРИФТОРМЕТИЛНИТРОБЕНЗОЛА И ОСОБЕННОСТИ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ СПЕКТРА ЭПР**

Мельников П.В., Шундрин Л.А., Поленов Е.А.

Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М.В.Ломоносова

Анион-радикал пара(бис)трифторметилнитробензола 2,5-(CF<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>NO<sub>2</sub> (I) был получен стационарной катодной генерацией в ДМФА. Была изучена температурная зависимость спектра ЭПР при 205-300 К. Модуляция СТС, вызвана медленным заторможенным вращением CF<sub>3</sub>-группы, соседней с NO<sub>2</sub>-группой. Спектры ЭПР были записаны в виде числовых массивов по 4096 точек  
<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=610>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=610>

**АЛГОРИТМ И ПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ЧАСТИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ И ЭНТРОПИИ АНСАМБЛЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР**

Деянов Р.З., Новосадов Б.К., Тарасов Ю.И.

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Алгоритм основан на решении интегрального уравнения Блоха [1-3] методом теории возмущений, в котором рассмотрены два порядка и получены выражения, учитывающие в явном виде рассчитанное неэмпирическими методами ангармоническое силовое поле молекулы. Алгоритм включает кубические и квартичные силовые постоянные  
<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=577>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=577>

**АНИОН-РАДИКАЛ ОРТО-НИТРОБЕНЗОТРИФТОРИДА В СМЕСЯХ ДМФА-ВОДА ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА. ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СПЕКТРОВ ЭПР И СПЕКТРАЛЬНЫЕ РЕЖИМЫ ЗАТОРМОЖЕННОГО ВРАЩЕНИЯ CF<sub>3</sub>-ГРУППЫ**

Мельников П.В., Шундрин Л.А., Поленов Е.А.

Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М.В.Ломоносова

Температурная зависимость спектра ЭПР анион-радикала (AP) ортонитробензотрифторида 2-CF<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NO<sub>2</sub> (I), полученного электрохимической генерацией, в настоящей работе была изучена в смесях ДМФА-ВОДА переменного состава  
<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=634>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=634>

**АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ТЕОРИИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ**

Норман Г.Э.

Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН

Рассматривается теория метода молекулярной динамики (ММД): экспоненциальная расходимость решений уравнений Ньютона, энтропия Крылова-Колмогорова, время динамической памяти, малые, но конечные флуктуации полной энергии, стохастические свойства ММД, статистический смысл усреднения в ММД и др  
<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=620>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=620>

**ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ КОНФОРМАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ L- И D-АРГИНИНА****Демухаммедова С.Д., Алиева И.Н., Годжаев Н.М.**

Бакинский государственный университет

В данной работе приведены результаты квантово-химических расчетов для L- и D-стереоизомеров аргинина в различных конформационных состояниях основной цепи нейропептидов семейства галлатостатинов и их химически модифицированных аналогов, участвующих в механизмах транспорта химических сигналов внутрь клетки

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=575><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=575>**ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ КАТИОНА  $ALK_4NBR$  НА СКОРОСТЬ РАСПАДА ПЕРОКСИДА ЛАУРИЛА. СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ РЕАКЦИИ****Умецкий И.Н., Туровский Н.А., Голубицкая Н.А., Опейда И.А.**

Детская поликлиника №31

В приближении модели субстраторазделенной ионной пары исследовано влияние химической структуры катиона ониевого бромида ( $Q^+Br^-$ ) на скорость активированного распада пероксида лаурила (ROOR)

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=647><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=647>**ВЛИЯНИЕ ТЯЖЕЛОГО АТОМА НА БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНУЮ КОНВЕРСИЮ МЕЖДУ ВОЗБУЖДЕННЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ПП\*-ТИПА****Гастилович Е.А., Серов С.А., Клименко В.Г., Королькова Н.В.,****Нурмухаметов Р.Н.**

ГНЦ РФ "НИФХИ им. Л.Я. Карпова"

Полагаем, что этот эффект мог бы найти объяснение в рамках теоретической модели, названной нами SISC-spin-induced internal conversion. Для выявления ее эффективности выполнена оценка влияния атомов Cl на величину константы скорости  $K_{isc}(пп)$  на примере молекулы OCDD (октахлордibenzo-p-диоксина:  $C_{12}O_2Cl_8$ ) при переходе  $S_1(B_{2u}) \rightsquigarrow T_6(B_{1u})$  между ближайшими по энергии состояниями

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=586><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=586>**ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ В РЕАКЦИИ ПЕРЕНОСА ВОДОРОДА****Калниньш К.К.**

Институт высокомолекулярных соединений РАН

По данным пико- и фемтосекундной спектроскопии с временным разрешением, фотоперенос водорода в элементарном акте реакции распадается на последовательные стадии переноса электрона и протона. Значительные трудности представляет объяснение механизма реакции термопереноса водорода, которая в растворе обычно протекает легко с низкими энергиями активации  $E_a$  при обычных условиях. В докладе высказывается предположение о том, что термохимическая реакция протекает через электронно-возбужденное состояние донорно-акцепторного комплекса реагентов. Для кристаллических комплексов между хинонами и гидрохинонами (хингидронов) ранее получены большие величины  $E_a$  1.5–2 эВ, близкие к энергиям оптических переходов с переносом заряда. Обосновывается идея о том, что в основе реакции термопереноса водорода лежит электронно-протонный эффект

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=591><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=591>

## ГИПОТЕТИЧЕСКИЙ СЦЕНАРИЙ МАТРИЧНОГО СИНТЕЗА ИОННЫХ КАНАЛОВ ЗЕРКАЛЬНОГО АНТИПОДА ПРИРОДНОЙ КЛЕТКИ

Марков И.В., Ляпин М.Г., Коротина А.С., Дмитриев А.В., Твердислов В.А.  
Липецкий филиал ОРАГС

В результате проведения численного эксперимента установлено, что для получения первичной структуры любого D-белка, функционально эквивалентного природному, достаточно комбинации 10 аминокислот: G, A, S, C, D, N, K, H, F, P. В таком «зеркальном мире» таблица генетического кода будет включать 10 аминокислот. При этом стерические напряжения в белках, обусловленные изомеризацией его аминокислот, снимали методами молекулярной динамики в интервале 2пс и шагом 0.001пс. При построении функции потенциальной энергии молекулы мы использовали представление и параметризацию силового поля AMBER

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=605>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=605>

## ДИЗАЙН БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МГТА И КОМПЬЮТЕРНОЙ ГЕНЕРАЦИИ СТРУКТУР

Мельников А.А., Радченко Е.В., Палюлин В.А., Зефириов Н.С.  
Институт физиологически активных веществ РАН

Разработан программный комплекс для дизайна новых соединений с заданной биологической активностью. Испытания данного программного комплекса показали, что предлагаемый подход позволяет найти соединения, для которых прогнозируется более высокая биологическая активность по сравнению с соединениями из обучающей выборки

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=607>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=607>

## ЗАВИСИМОСТЬ СТРОЕНИЯ ДИСОЛЬВАТА ПРОТОНА ОТ СВОЙСТВ ОБРАЗУЮЩИХ ЕГО МОЛЕКУЛ

Цой О.Ю., Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В.  
Институт общей и неорганической химии им. Н.С.Курнакова РАН

Цель настоящей работы заключалась в изучении методом квантовой химии строения и свойств мостиков  $O...H^+...O$ ,  $O...H^+...N$  и  $N...H^+...N$ , образованных молекулами оснований с разной протоноакцепционной способностью

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=644>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=644>

## ИЗУЧЕНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ МЕТИЛФЕНИЛСУЛЬФИДА $C_6H_5SCH_3$ И ТРИФТОРМЕТИЛФЕНИЛСУЛЬФИДА $C_6H_5SCF_3$

Лобанова Н.Г., Гиричева Н.И.  
Ивановский государственный университет

Данная работа посвящена квантово-химическому исследованию конформационных свойств молекул метилфенилсульфида  $C_6H_5SCH_3$  и трифторметилфенилсульфида  $C_6H_5SCF_3$ . Исследование проводилось с помощью программы Gaussian'03 двумя разными методами с использованием одного и того же базиса:

RHF/6-31G\* и B3LYP/6-31G\*  
<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=601>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=601>



**ИНТЕРНЕТ-ДОСТУП К БАЗАМ ДАННЫХ ПО ИК-СПЕКТРОСКОПИИ И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ ФРАГМЕНТОВ ИССЛЕДУЕМОГО СОЕДИНЕНИЯ****Гусева Т.И., Чмутина К.С., Богданова Т.Ф., Пиоттух-Пелецкий В.Н.**

Новосибирский институт биоорганической химии им. Н.Н.Ворожцова СО РАН

Традиционно базы данных по молекулярным спектрам используются совместно с соответствующим спектрометрами для решения задач идентификации соединений по их спектрам. Решение более сложных задач установления строения соединений на основе спектральной информации и имеющихся баз данных обычно требует либо значительных усилий по ручному анализу результатов спектрального поиска, либо разработки специализированных алгоритмов анализа этих результатов. Предлагается оригинальный алгоритм извлечения структурной информации из результатов спектрального поиска, основывающийся на использовании полных фрагментных составов структур в БД

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=590><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=590>**ИНФОРМАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ: ВЗГЛЯД ХИМИКА, СПЕКТРОСКОПИСТА, МАТЕМАТИКА****Пиоттух-Пелецкий В.Н.**

Новосибирский институт органической химии СО РАН

Рассматриваются базовые для задач химической информатики аспекты информационной ёмкости структуры молекул органических соединений с точки зрения задач, актуальных для органической химии, аналитических приложений молекулярной спектроскопии, теории графов. Обсуждаются также проблемные аспекты, связанные с информационной обеспеченностью выводов и корректностью статистических обобщений в задачах типа «структура-свойство» для подмножеств структурно родственных соединений

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=630><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=630>**ИССЛЕДОВАНИЕ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ И ЭФФЕКТА ВЛИЯНИЯ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ В МОЛЕКУЛАХ ПАРА-МЕТИЛБЕНЗОЛСУЛЬФАМИДА (4-МБСА) И ОРТО-МЕТИЛБЕНЗОЛСУЛЬФАМИДА (2-МБСА)****Бардина А.В., Гиричева Н.И., Петров В.М.**

Ивановский государственный университет

Данная работа посвящена исследованию геометрического строения и конформационных особенностей молекул метилзамещенных бензолсульфамидов. Проведены расчеты структурных параметров молекул пара-метилбензолсульфамида и орто-метилбензолсульфамида квантовохимическим методом B3LYP в базисе 6-311+G\*\* с использованием расчетного комплекса GAUSSIAN-2003. Квантовохимические расчеты барьеров внутреннего вращения 4-МБСА и 2-МБСА проводились методом Хартри-Фока в базисе 6-31G\* с использованием расчетного комплекса GAUSSIAN-2003. Для определения потенциальных функций внутреннего вращения были рассчитаны зависимости полной энергии молекул от величин торсионных углов  $C_{Ph}-C_{Ph}-C_{мет}-H$  (для группы  $CH_3$ ),  $C_{Ph}-S-N-H$  (для группы  $NH_2$ ),  $C_{Ph}-C_{Ph}-S-N$  (для группы  $SO_2NH_2$ )

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=569><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=569>**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ НИТРОЗОКСИДОВ С ОЛЕФИНАМИ****Талипов М.Р., Хурсан С.Л., Сафиуллин Р.Л.**

Институт органической химии Уфимского научного центра РАН

Методами DFT локализованы минимумы на синглетной ППЭ системы транс- $HNOO + C_2H_4$ . Показано, что энергетически наиболее выгодным маршрутом реакции является согласованное (3+2)-циклоприсоединение с образованием пятичленного гетероцикла. Образованный гетероцикл распадается с синхронным разрывом C-C и O-O-связей на нитрон и альдегид; этот элементарный акт характеризуется низкой энергией активации ( $E_a = 9.4$  кДж·моль<sup>-1</sup>,  $\Delta H = -111.1$  кДж·моль<sup>-1</sup> в приближении CR-CCSD(T)/6-311+G(d,p))

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=636><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=636>

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТАУТОМЕРНОГО РАВНОВЕСИЯ ОСНОВАНИЙ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ****Тен Г.Н., Баранов В.И.**

Саратовский государственный университет

Предложен полуэмпирический квантово-химический метод оценки параметров, характеризующих стабильность и таутомерное равновесие, и на их основе проведёны модельные расчёты относительных констант кислотности и основности оснований нуклеиновых кислот (ОНК) и их таутомерных форм. Дана общая характеристика влияния водного растворителя на таутомерное равновесие ОНК

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=639>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=639>

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КРЕМНИЕВЫХ ПОЛИЭДРОВ****Исхакова Н.Ф., Томилин О.Б., Сыркина Н.П.**

Мордовский государственный университет имени Н.П.Огарева

Исследование закономерностей сопряженной системы изомеров кремниевых полиэдров  $Si_{36}$  (с симметрией  $D_{6h}$ ,  $D_{3h}$ ,  $D_{2d}$ ) и  $Si_{60}$  (с симметрией  $I_h$ ,  $D_{5d}$ ,  $C_{2v}$ ,  $C_2$ ,  $D_{2h}$ ) проводилось путем оптимизации геометрии данных молекул методом РМЗ с последующим использованием индексов Вайберга WAA для связи А-А

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=641>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=641>

**К ВОПРОСУ О ЗАРЯДОВОЙ ЗАВИСИМОСТИ КОНСТАНТ СТВ В СПЕКТРАХ ЭПР ОРГАНИЧЕСКИХ П-РАДИКАЛОВ****Новосадов Б.К., Поленов Е.А., Смекалкин Д.М.**

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Необходимые для анализа динамических эффектов в спектрах ЭПР алкилзамещённых п-радикалов конформационные функции стереоцифических констант изотропного сверхтонкого взаимодействия (ИСТВ) с ядрами  $^1H$ ,  $^{19}F$ , были выведены на основе орбитально-симметричного анализа

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=621>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=621>

**КВАНТОВО-ТОПОЛОГИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕКОВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВО ВТОРИЧНЫХ СТРУКТУРАХ ОЛИГО- И ПОЛИАЛАНИНОВ****Венер М.В., Егорова А.Н., Фомин Д.П., Цирельсон В.Г.**

Российский химико-технологический университет им.Д.И.Менделеева

В рамках квантово-топологической теории Бейдера выявлены и количественно охарактеризованы (метод Кона-Шэма, уровень расчета V3LYP/6-31+G\*\*), как известные ранее, так и «дополнительные» нековалентные (по типу замкнутых оболочек) межатомные взаимодействия во вторичных структурах олиго- ( $\gamma$ - и  $\beta$ -петели) и полиаланинов ( $\beta$ -складчатые листы и  $\alpha$ -спирали)

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=651>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=651>

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ И ПРОГНОЗ ФОТОХИМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ АРОМАТИЧЕСКИХ АЗИДОВ****Будыка М.Ф.**

Институт проблем химической физики РАН

Обобщены результаты квантово-химических исследований реакции фото-диссоциации ароматических азидов

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=572>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=572>

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ИЗОМЕРНЫХ АЗА-СТИРИЛНАФТАЛИНОВ В ОСНОВНОМ И НИЗШЕМ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННОМ СОСТОЯНИЯХ****Ошкин И.В., Будыка М.Ф.**

Институт проблем химической физики РАН

С целью моделирования реакции фотоизомеризации полуэмпирическим методом PM3 и методом функционала плотности B3LYP с базисом 6-31G\* проведены расчеты транс- и цис-изомеров 1-стирилнафталина и его аза-производных: 4-стирилхинолина, 1-стирилизохинолина, 8-стирилхинолина и их протонированных форм в основном ( $S_0$ ) и низшем синглетно-возбужденном ( $S_1$ ) состояниях

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=623><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=623>**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ ПРОТИВОИОНА И ЭФФЕКТА СРЕДЫ НА УСТОЙЧИВОСТЬ И АРОМАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АРОМАТИЧЕСКИХ КАТИОНОВ НА ПРИМЕРЕ КАТИОНА ПИРИЛИЯ****Милов А.А.**

ЮНЦ РАН

При помощи квантово-химических расчетов методами ab initio (MP2(full)/6-311++G\*\*) и теории функционала плотности (B3LYP/6-311++G\*\*) исследованы комплексы катиона пирилия I в условиях газовой фазы и в двух растворителях различной природы (бензол и ДМСО)

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=612><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=612>**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КЛЮЧЕВЫХ СТАДИЙ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ N<sup>3</sup> АЛЛИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ ИЗ СОПРЯЖЕННЫХ ДИЕНОВ РАЗЛИЧНОГО СТРОЕНИЯ****Шамсиев Р.С., Морозова Т.А., Белов А.П.**

Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М.В.Ломоносова

Целью настоящей работы было квантово-химическое моделирование ключевых стадий процесса образования аллильных комплексов палладия из сопряженных диенов различного строения: бутадиена, 2-метил-бутадиена (изопрена), пентадиена, транс, транс-2,4-гексадиеновой (сорбиновой) кислоты

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=615><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=615>**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ТРИЭТИЛАЛЮМИНИЯ С ХЛОРАЛКАНАМИ****Загидуллина А.Э., Вакулин И.В., Талипов Р.Ф.**

Башкирский государственный университет

В работе изучены возможные комплексы триэтилалюминия с дихлорметаном и дихлорэтаном

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=654><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=654>**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ AL,ZR-КОМПЛЕКСА КАК КЛЮЧЕВОГО ИНТЕРМЕДИАТА В РЕАКЦИИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ГИДРОАЛЮМИНИРОВАНИЯ ОЛЕФИНОВ****Панкратьев Е.Ю., Тюмкина Т.В., Халилов Л.М., Парфёнова Л.В., Хурсан С.Л., Джемилев У.М.**

Институт нефтехимии и катализа РАН

В процессе гидроалюминирования олефинов ди изо бутилалюминийгидридом (ДИБАГ) в присутствии каталитических количеств  $Cp_2ZrCl_2$  образуется ключевой интермедиат 1 – i-Bu<sub>2</sub>Al(HCl)ZrCp<sub>2</sub>(H)<sub>2</sub>ZrCp<sub>2</sub>(HCl)Al-i-Bu<sub>2</sub>. В скобках указаны мостиковые атомы. Для определения детального механизма образования 1 мы выполнили серию DFT-расчетов возможных направлений реакции

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=626><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=626>

**КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ И МОДЕЛИ СТРУКТУРЫ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ НАНОСИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ТИТАНА**

Успенский К.Е., Бабков Л.М., Безродная Т.В., Пучковская Г.А., Шимановская В.В.

Саратовский государственный университет

Анализ колебательных спектров гетерогенных двухкомпонентных систем, представляющих собой твердые смеси нанокристаллитов диоксида титана ( $\text{TiO}_2$ ), с бензофеноном (БФ) или 4-пентил-4'-цианобифенилом (5ЦБ), измеренных при комнатной температуре, указывает на образование в образцах водородной связи с участием воды, адсорбированной поверхностью нанокристаллитов  $\text{TiO}_2$

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=566><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=566>**КОМПЛЕКСНЫЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ МЕХАНИЗМОВ КАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ НА ПРИМЕРЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ СОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ С ДИХЛОРИДОМ ПАЛЛАДИЯ**

Морозова Т.А., Крылов А.В., Флид В.Р., Белов А.П.

Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М.В.Ломоносова

Настоящая работа посвящена изучению механизма комплексообразования сорбиновой кислоты с дихлоридом палладия с использованием теоретических и экспериментальных методов, сочетающихся в рамках единой стратегии исследования. Расчеты выполнены методом DFT/PBE

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=614><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=614>**КОМПЬЮТЕРНЫЕ МЕТОДЫ УСТАНОВЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ: ДОСТИЖЕНИЯ, ПРОБЛЕМЫ, ПЕРСПЕКТИВЫ**

Эляшберг М.Е., Блинов К.А., Молодцов С.Г.

Advanced Chemistry Development (ACD)

В докладе рассматриваются итоги развития компьютерных методов установления структуры молекул по их спектрам за последние сорок лет

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=584><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=584>**МАТРИЦЫ СМЕЖНОСТИ И ГРАФЫ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ**

Михайлов И.В.

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

Громадное множество молекулярных объектов и химических превращений исходного продукта, оценить которые даже грубо на основании интуитивных соображений не представляется возможным, приводит к мысли о необходимости разработки простых приёмов своеобразного мониторинга реакций. Возможные «реакционные связи» во множестве взаимопревращающихся структур предлагается описывать в форме матрицы смежности и разветвленного графа (дерева) наиболее вероятных химических превращений

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=611><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=611>**МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА МОЛЕКУЛ**

Дзябченко А.В.

Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я.Карпова

Описание молекулярного электростатического потенциала (МЭП) является ключевым моментом при подборе потенциала межмолекулярного взаимодействия. В работе представлены результаты аппроксимации трехмерных распределений МЭП, полученных расчетом изолированной молекулы неэмпирическим методом МО ЛКАО, аналитическими потенциалами атомных зарядов (АЗ), реальных диполей (РД) и атомных мультиполей (АМ) до квадрупольно включительно. Потенциал РД создается парами точечных зарядов противоположного знака, поиск их расположения в объеме молекулы входит в задачу аппроксимации

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=582><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=582>

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОГО ПРОЦЕССА ЦИКЛОПРЕВРАЩЕНИЯ  
КОНДЕНСИРОВАННЫХ 5-НИТРОПИРИДИН-2-ОНОВ В УСЛОВИЯХ ГИДРАЗИНОЛИЗА****Смоляр Н.Н., Ютилов Ю.М.**

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М.Литвиненко НАН Украины

Мы показали, что 5-нитро-2-оксопиридиновый фрагмент в конденсированных гетероциклах под действием гидразингидрата превращается в пиридазиновый и предложили вероятный механизм данного превращения.

Детали механизма нашли экспериментальное подтверждение на модельных соединениях

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=635>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=635>

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ РЕАКЦИЙ ГИДРОЛИЗА  
НУКЛЕОЗИДТРИФОСФАТОВ****Немухин А.В., Григоренко Б.Л., Шадрин М.С.**

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова

В работе приводятся результаты моделирования механизмов реакций ферментативного гидролиза нуклеозидтрифосфатов, прежде всего, гуанозинтрифосфата (ГТФ) и аденозинтрифосфата (АТФ), с использованием методов молекулярной динамики и комбинированных приближений квантовой и молекулярной механики (КМ/ММ)

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=525>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=525>

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ АЛЛОТРОПНЫХ ФОРМ УГЛЕРОДА****Корнилов М.Ю.**

Киевский национальный университет им. Т.Шевченко

Обсуждаются способы компьютерного моделирования углеродных наноструктур (УНС): ручная, автоматизированная и полуавтоматизированная сборка. Предлагается понятие «элементарного фрагмента бесконечной УНС». Повторяя его в 2-х (или 3-х) направлениях и объединяя части, можно собрать УНС любого размера.

Приводятся модели новых аллотропных форм углерода

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=595>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=595>

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СИЛЬНЫХ (КОРОТКИХ) ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В ТРЕХМЕРНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ  
КРИСТАЛЛАХ: КВАНТОВО-ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД****Манаев А.В., Венер М.В., Егорова А.Н., Цирельсон В.Г.**

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

С использованием квантово-топологической теории молекулярной структуры Бейдера изучены характеристики критических точек электронной плотности  $\bar{O}N...A$  фрагмента ( $A = O, N$ ) в молекулярных кристаллах с сильными водородными связями. Использовалась волновая функция (уровень расчета B3LYP/6-31G\*\*) основного состояния 28 трехмерных периодических кристаллов, структуры которых были получены из эксперимента. Учет электронной корреляции позволил получить надежные значения электронной плотности ( $\rho_b$ ) и ее лапласиана ( $\nabla^2\rho_b$ ) в критических точках связей  $\bar{O}N$  и  $\bar{N}...A$

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=652>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=652>

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ ЭПР АНИОН-РАДИКАЛОВ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА  
ОСНОВАНИИ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ****Жильцов В.В., Казакова В.М.**

Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М.В.Ломоносова

Рядом квантовохимических методов проведен расчет анион-радикалов 1-метил-1-фенил-1-силациклобутана, 1,1-диметил-1-силаиндена, 1,1,1-триметил-1-фенилсилана, их моделей и аналогов. В литературе отсутствуют данные по геометрическому строению анион-радикалов 1-метил-1-фенил-1-силациклобутана и 1,1-диметил-1-силаиндена, необходимые при проведении расчетов многими квантовохимическими методами. Поэтому мы провели расчет ряда различных геометрических конфигураций, варьируя длины связей и валентные углы, используя планарную и непланарную конформацию гетероцикла

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=655>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=655>

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ 2-, 3-, 4-БИФЕНИЛМЕТАНОЛОВ  
МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ****Успенский К.Е., Бабков Л.М., Баран Я., Давыдова Н.А.**

Саратовский государственный университет

По экспериментальным ИК спектрам твердокристаллических (ТК) образцов 2-, 3- и 4-бифенилметанолов (2-, 3-, и 4БФМ), измеренным при комнатной температуре, 2БФМ в стеклофазе установлено наличие в них водородной связи. Методом теории функционала плотности (B3LYP/6-31G\*) рассчитаны энергии, структуры, дипольные моменты, поляризуемости, частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении и интенсивности в колебательных спектрах молекул 2-, 3- и 4БФМ и фрагментов их Н-комплексов, которые могут реализовываться в различных фазовых состояниях. На основе анализа результатов моделирования и экспериментальных спектров выяснено влияние положения группы метанола в молекулах на колебательные спектры, строение молекулярных систем, обусловленное образованием в них водородной связи, и проявление ее в спектрах ТК образцов 2-, 3- и 4БФМ и 2БФМ в различных фазовых состояниях. 2БФМ. Теоретически обоснована структура реализующихся в ТК состояниях 2БФМ двух различных полиморфных модификаций: нестабильной моноклинной, состоящей из цепочечных Н-ассоциатов, при этом каждая из четырех молекул элементарной ячейки является звеном своей цепочки, и стабильной триклинной, в которой четыре молекулы 2БФМ элементарной ячейки с помощью Н-связи объединены в циклические тетрамеры. ТК образцы 3- и 4-бифенилметанолов состоят из цепочечных Н-ассоциатов. В стеклообразном образце 2БФМ наряду с тетрамерами присутствуют димеры и цепочечные ассоциаты

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=565>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=565>

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛ 2,4- И 2,6-ДИНИТРОАНИЗОЛОВ****Демухаммедова С.Д., Гаджиев З.И.**

Бакинский государственный университет

Настоящее сообщение посвящено теоретическому исследованию колебательных спектров молекул 2,4- и 2,6- динитроанизолов. Уже на экспериментальных спектрах молекул 2,4- и 2,6- динитроанизолов, взятых из атласа Садтлера, достаточно хорошо видна структурная разница молекул. Особый интерес для теоретического исследования представляют широкие интенсивные полосы поглощения, соответствующие симметричным и асимметричным колебаниям NO<sub>2</sub> групп в модельных молекулах 2,4- и 2,6- динитроанизолов, имеющих одинаковый химический состав, но различное присоединение групп NO<sub>2</sub> к бензольному кольцу относительно группы СО-СН<sub>3</sub>

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=576>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=576>

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ И МОЛЕКУЛ ПИРИДИНА И ДИПИРИДИЛЭТИЛЕНА  
ПАРАМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ****Соловьев А.Н., Баранов В.И.**

Смоленский сельскохозяйственный институт

В рамках второго приближения параметрического метода проведен расчет структуры молекул пиридина (ПД) и дипиридилэтилена (ДПЭ) в возбужденном состоянии и их электронно-колебательных спектров. Полученная система пара-метров, включающая в себя параметры  $\sigma$ - и  $\pi$ -типа, обеспечивает количественное согласие теоретических спектров ПД и ДПЭ с экспериментальными. Параметризация носит достаточно полный характер и позволяет моделировать на количественном уровне колебательную структуру спектров сложных молекул, содержащих аналогичные фрагменты, как для  $\sigma\pi^*$ -, так и  $\pi\pi^*$ -переходов

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=568>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=568>

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОХИМИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОГО РАСКРЫТИЯ ЦИКЛА В МОЛЕКУЛЕ СПИРОПИРАНА**

Гугава М.Т., Девадзе Л.В., Джапаридзе К.Г., Майсурадзе Д.П., Сепашвили Н.О.

Институт Кибернетики Грузии

Для целенаправленного синтеза веществ с улучшенными свойствами, наряду со спектрально-кинетическими исследованиями, проводили квантовохимический расчет методом MINDO-3 молекулы спиропирана с различными заместителями в хромоновой части.

Оказалось, что по мере усиления электроноакцепторных свойств заместителя по сравнению с электронодонорными и незамещенными аналогами, возрастает величина перешедшего заряда и происходит гипсохромное смещение полосы поглощения. Электроноакцепторным заместителям соответствуют низкоэнергетические переходы и батохромное смещение полосы поглощения.

Квантовохимические расчеты находятся в хорошем согласии со спектрально-кинетическими измерениями

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=588>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=588>

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ АДЕНИНА, ГУАНИНА, ПУРИНА, ЦИТОЗИНА, УРАЦИЛА**

Элькин П.М., Пулин В.Ф.

Саратовский государственный технический университет

На основании проведенных расчетов предложена интерпретация колебательных спектров исследуемых молекул, дан анализ характер поведения интенсивностей ИК и КР полос, позволяющий идентифицировать конформационные и таутомерные свойства соединений, выяснен характер межмолекулярных взаимодействий.

Показано, что влияние резонансных ангармонических эффектов укладывается в рамки адиабатической теории возмущения второго порядка, а для анализа таутомерных свойств молекул следует привлекать экспериментальные данные оберточной спектроскопии

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=583>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=583>

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА И ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОПОРФИРИНОВ**

Бахтин А.В., Тарасов Ю.И., Гольдштрах М.А., Ищенко А.А.

Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М.В.Ломоносова

Рассмотрены модели взаимодействия свободных молекул этиопорфиринов меди(II) и цинка(II) в основном и в возбужденном состояниях с молекулами газообразных примесей (аммиак, вода). Для более детального понимания воздействия электронодонорных газов на тонкие пленки металлопорфиринов были выполнены квантово-химическое исследование механизма рассмотренной реакции присоединения:  $MP + L \leftrightarrow (L)MP$ ;  $MP$  – металлопорфирин,  $L$  – лиганд

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=637>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=637>

**МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ – ВАЖНОЕ ЗВЕНО ПРИ ИЗУЧЕНИИ ТЕМЫ «ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ»**

Гусакова Н.Н., Кольцов А.А.

ФГОУ ВПО «Саратовский ГАУ им.Н.И.Вавилова»

Рассматриваются возможности и накопленный опыт использования методов молекулярного моделирования при преподавании курса общей химии студентам сельскохозяйственных специальностей.

Особенности разработанной методики анализируются детально на примере темы «Химическая связь»

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=589>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=589>

**МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОМОЛИЗА ТРЕТИЧНЫХ ГИДРОПЕРОКСИДОВ**

Туровский Н.А., Ракша Е.В., Туровская Е.Н., Ракша А.В., Опейда И.А.

Донецкий национальный университет

Проведено молекулярное моделирование гомолиза пероксидной связи ряда третичных гидропероксидов (ROOH) аралкильного ряда с удаленной от ароматического кольца гидропероксидной группой и различными заместителями в кольце

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=646>

<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=646>

## МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАТОЛОГИЙ ИОННЫХ КАНАЛОВ В ПРОЦЕССЕ СТАРЕНИЯ КЛЕТКИ

Дмитриев А.В., Ляпин М.Г., Коротина А.С., Твердислов В.А.  
Липецкий филиал ОРАГС

В результате проведения численного эксперимента установлено, что в процессе старения организма ионные каналы становятся энергетически менее стабильными, чем каналы молодого организма. При этом наблюдается незначительное увеличение ионных токов и сохранение отношений коэффициентов проницаемостей для различных ионов и проводимостей. Переход каналов из открытого состояния в закрытое состояние при изменении разности потенциалов на концах мембраны является медленным, по сравнению с данным переходом для каналов молодого организма. Фермент-субстратный комплекс NR1-активного центра NMDA-рецептора молодого организма и природного субстрата энергетически более стабилен, чем комплекс D-Asp-изомера NMDA-рецептора и природного субстрата. Таким образом, процесс старения сопровождается снижением стабильности фермент-субстратного комплекса и возможными нарушениями в работе NMDA-рецептора

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=579>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=579>

## МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ МЕТОДОМ MNDO/PM3

Сухно И.В., Павленко А.В., Кашаев Д.В., Агаджанова С.А., Бузько В.Ю.

Кубанский государственный университет

Квантовохимическим методом MNDO/PM3 рассчитаны структурные и энергетические характеристики производных тиакаликс[4]аренов, замещенных по верхнему или нижнему ободу  $\text{CH}_3$ -,  $\text{OH}$ - и  $\text{HOOCCH}_2$ -функциональными группами

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=628>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=628>

## МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ ОЛИГОМЕРОВ ТРИФТОРАЦЕТАТОВ AG(I), CU(I)

Бажанова З.Г., Тарасов Ю.И., Болталин А.И., Ковтун Д.М., Новосадов Б.К., Кочиков И.В.

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Проведены квантово-химические расчеты энергетических характеристик и структуры фторацетатов серебра, меди и их простейших олигомеров методом B3LYP с использованием параллельной версии пакета PC GAMESS [1] в базисе cc-pVTZ для атомов C, O, F, а для атомов Ag были использованы псевдопотенциалы и базис Stuttgart 1997 RSC

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=638>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=638>

## МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН КАРКАСНЫХ СТРУКТУР С 1-5 СВЯЗЫВАНИЕМ МОСТИКОВЫХ АТОМОВ SI И P

Доронина Е.П., Сидоркин В.Ф.

Иркутский институт химии им. А.Е.Фаворского СО РАН

Проведено конструирование (B3LYP, MP2) каркасных структур, содержащих в головках 1,8-нафтильного мостика атомы кремния и фосфора. Найдены их возможные изомеры а, б отличающиеся положением заместителя X и конфигурацией атома фосфора с

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=581>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=581>

## НОВЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ В ПРИМЕНЕНИИ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В МОЛЕКУЛЯРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Баскин И.И., Жохова Н.И., Карпов П.В., Кравцов А.А., Курило М.В., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Современный этап развития теоретической химии характеризуется широким внедрением методов химической информатики [1, 2], в основе которых лежат современные достижения вычислительной математики в области искусственного интеллекта и теории машинного обучения. В докладе приведен обзор последних достижений авторов а также основных направлений ведущихся работ в области применения методологии искусственных нейронных сетей для прогнозирования физико-химических свойств органических соединений, констант комплексообразования и констант скоростей органических реакций

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=570>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=570>



**НОВЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ СИМБИОЗА МОДЕЛЕЙ ИНФОРМАЦИОННОГО ПОЛЯ И СИМПЛЕКСНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ****Кузьмин В.Е., Огниченко Л. Н., Артеменко А. Г.**

Физико-химический институт НАН Украины

Разработана схема генерации новых структурных параметров – молекулярных симплексов, взвешенных на основе параметров информационного поля.

Модель информационного поля с формальных позиций описывает ситуацию, когда объект структурирует окружающее его пространство, т. е. генерирует в нем информацию. Информационное поле сложного объекта (молекулы) является суперпозицией соответствующих информационных полей элементов (атомов) этого объекта. Используя какое-либо свойство элементов, можно построить взвешенные информационные поля. В рамках концепции информационного поля каждый атом «чувствует» информационное влияние всех остальных атомов молекулы. Характер такого влияния зависит, как от свойств атомов, положенных в основу построения информационного поля, так и от их взаимного положения. Из анализа различных модельных систем удалось выявить некоторые особенности взаимного влияния атомов, определяемые их природой, а также топологией и геометрией молекулы

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=599><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=599>**НОВЫЙ МЕТОД ОЦЕНКИ СТЕПЕНИ СИММЕТРИЧНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СТРУКТУР: ИНДЕКСЫ ОТКЛОНЕНИЯ ГЕОМЕТРИИ ОТНОСИТЕЛЬНО ЗАДАННОЙ ГРУППЫ ПОДСТАНОВОК****Трач С.С., Зефилов Н.С.**

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

В докладе проанализированы основные трудности метода Авнира и предложен гораздо более простой метод нахождения степени симметрии, основывающийся на вычислении индекса отклонения геометрии относительно заданного множества подстановок (не обязательно связанных с молекулярными симметриями). Стандартные значения новых индексов (Дельта-индексов) получаются суммированием усредненных отклонений для всех пар атомов, а парциальные и нормализованные значения получаются делением стандартных индексов соответственно на числа атомов и пар атомов

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=642><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=642>**НОТАЦИОННЫЕ ДЕСКРИПТОРЫ ЯЗЫКА QLX ИНФОРМАЦИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ «МИКРОКОСМ»****Васильев П.М.**

Волгоградский государственный медицинский университет

В рамках информационной технологии «Микрокосм» с использованием новой версии языка QLx методами автопрогноза, скользящего, двойного скользящего и перекрестного контролей для консервативной, нормальной и рискованной стратегий произведено тестирование точности прогноза различных видов фармакологической активности по банку данных используемых в мировой практике лекарственных веществ. Показано, что расширение основного структурного QL-описания соединений нотационными электронными дескрипторами существенно увеличивает точность прогноза различных видов фармакологической активности

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=649><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=649>**ОБ ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛЬНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ МАКРОСИСТЕМЫ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ ГИББСА****Крылов А.Ф.**

Саратовский государственный университет

Особенностью «статистической отрасли механики», предложенной Д. Гиббсом, является необходимость мысленной индивидуализации, нумерации атомных частиц, образующих макросистему

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=597><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=597>

**ОТ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДО ЛЕКАРСТВА (НА ПРИМЕРЕ ДИМЕБОНА)****Палюлин В.А., Бачурин С.О., Зефирова Н.С.**

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

В докладе детально рассматривается роль молекулярного моделирования в создании новых лекарственных препаратов.

На примере новейшего нейропротекторного препарата димебона (разрешенного ранее к применению в качестве антигистаминного препарата) продемонстрировано, каким образом с помощью комплекса расчетных и экспериментальных методов могут быть найдены новые уникальные свойства у уже применяемых по другому назначению лекарств

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=624>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=624>

**ОТБОР ПЕРЕМЕННЫХ В QSAR МОДЕЛЯХ ДЛЯ ЛЕКАРСТВЕННОЙ АКТИВНОСТИ****Цыганкова И.Г.**

Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН

В докладе будут продемонстрированы примеры построения корреляционных моделей, с использованием фрагментных дескрипторов молекулярной структуры, для лекарственной активности, сочетающие математические методы и исследовательскую интуицию и здравый смысл. Будет представлено сравнение традиционных подходов (метода пошаговой регрессии, метода выбора «наилучшего подмножества» предикторов) с новыми предложениями в этой области

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=971>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=971>

**ПРЕДСКАЗАНИЕ СПЕКТРОВ ЯМР В ЭКСПЕРТНОЙ СИСТЕМЕ STRUCTURE ELUCIDATOR****Блинов К.А., Смурный Е.Д., Чуранова Т.С., Эляшберг М.Е.**

Advanced Chemistry Development (ACD)

В докладе описываются разработанные авторами алгоритмы быстрого расчета  $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ ,  $^{15}\text{N}$  ЯМР спектров органических молекул двумя способами: методом инкрементов (полученных с использованием линейной регрессии) и с использованием искусственных нейронных сетей. Описана зависимость точности и скорости предсказания от выбранной модели описания химической структуры. Показано, что при оптимальной модели описания структуры оба упомянутых метода дают примерно одинаковую точность предсказания.

Достигнутая скорость расчета  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектров составляет 6000-8000 химических сдвигов в секунду при среднем отклонении рассчитанного сдвига 1.6-1.8 мд (для спектров  $^{13}\text{C}$ ). Приводятся результаты эффективного использования этих алгоритмов в рамках экспертной системы Structure Elucidator для установления структуры сложных природных соединений по двумерным ЯМР спектрам

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=571>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=571>

**ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ МОЛЕКУЛ А-АМИНОКИСЛОТ МЕТОДОМ AB INITIO ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ИХ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ В АРИЛСУЛЬФОНИЛИРОВАНИИ****Кочетова Л.Б., Кустова Т.П.**

Ивановский государственный университет

Нами выполнен ab initio-расчет электронных, структурных и энергетических характеристик молекул реагентов: арилсульфонилхлоридов, а также незаряженных и анионных форм аминокислот (в базисах 6-31G\*\* и 6-31++G\*\* соответственно). Анализ результатов квантово-химических расчетов геометрических характеристик молекул а-аминокислот показал, что существенных изменений в структуре реакционного центра – аминогруппы – в ряду нативных аминокислот не происходит. Вместе с тем электронные характеристики рассматриваемых молекул ( $q_N$ ,  $E_{\text{HOMO}}$ ,  $S_{p_z}$ ) претерпевают некоторые изменения и поэтому могут рассматриваться как индексы реакционной способности (ИРС)

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=594>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=594>

**ПРОГНОЗ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ В ИНФОРМАЦИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ «МИКРОКОСМ» С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АНАЛИЗА НЕПРОТИВОРЕЧИВОСТИ СПЕКТРА ПРОГНОЗНЫХ ОЦЕНОК****Васильев П.М.**

Волгоградский государственный медицинский университет

Предложена новая методика выработки высокодостоверных итоговых заключений об уровне заданного вида биологической активности не испытанных соединений путем сопоставления спектров прогнозных оценок различных градаций этой активности, полученных с использованием консервативной, нормальной и рискованной стратегий прогноза в информационной технологии «Микрокосм»

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=648><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=648>**ПРОГРАММА КОМПЬЮТЕРНОГО СИНТЕЗА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ****Мельников А.А., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефилов Н.С.**

Институт физиологически активных веществ РАН

Представлены результаты разработки программы для автоматизации планирования синтеза органических соединений, основанной на комбинации подходов эмпирического и неэмпирического компьютерного синтеза. Программа ориентирована на планирование синтеза высокоэнергетических соединений, однако в дальнейшем она может быть адаптирована и для других классов органических соединений

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=608><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=608>**ПРОСТОЙ МЕТОД УЧЕТА СИММЕТРИИ В ЗАДАЧАХ ПЕРЕЧИСЛЕНИЯ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ПРИЗМАНА И АДАМАНТАНА С АХИРАЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ****Трач С.С., Зефилов Н.С.**

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Согласно литературным данным, учет симметрии при решении задач перечисления изомеров замещения основывается на таких сложных конструкциях, как представления смежных классов и таблицы меток Бернсайда. В докладе показано, что эту задачу удастся решить на основе традиционной методологии Д. Пойа, используемой, однако, применительно к группам автоморфизмов орбитных графов, каждый из которых отвечает одной из (несопряженных) подгрупп точечной группы незамещенной структуры. Полученные результаты определяют количества замещенных производных, симметрия которых не ниже симметрии, связываемой с рассматриваемой подгруппой, - отсюда следует, что на последней стадии расчета необходимо находить разности значений для каждой из рассматриваемых подгрупп и всех ее надгрупп более высокого порядка

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=643><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=643>**РАЗДЕЛЕНИЕ ВЛИЯНИЙ АТОМОВ ХЛОРА И ИЗМЕНЕНИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ НА ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ ТРИПЛЕТ-СИНГЛЕТНОГО ПЕРЕХОДА****Клименко В.Г., Гаспилович Е.А., Королькова Н.В., Серов С.А.,****Нурмухаметов Р.Н.**

ГНЦ РФ «НИФХИ им. Л.Я. Карпова»

Теоретически, путем моделирования, исследовано влияние разных групп атомов (характеризующихся константой  $\zeta_A$  спин-орбитальной связи) на дипольный момент перехода  $T(\pi\pi^*) \rightarrow S_0$ , определяемого спин-орбитальными (SO) взаимодействиями, в молекулах полихлорированных производных дибензо-п-диоксина (PCDD) симметрии  $D_{2h}$  и дибезфурана (PCDF) симметрии  $C_{2v}$

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=593><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=593>**РАСЧЁТ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ИК И РКР СПЕКТРОВ 5-ГАЛОГЕНЗАМЕЩЕННЫХ УРАЦИЛА****Бурова Т.Г., Тен Г.Н., Баранов В.И.**

Саратовский государственный университет

В данной работе выполнен расчёт плоских колебаний и спектров 5F-Ura и 5Br-Ura методами валентно-оптической теории. В рамках данной теории в качестве исходных силовых и электрооптических полей могут быть использованы соот-ветствующие параметры для молекулы Ura, надежно определенные нами ранее, что весьма важно для получения адекватных молекулярных моделей и корректной интерпретации спектров 5F-Ura и 5Br-Ura

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=640><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=640>

## СВЯЗЬ МЕЖДУ КОЛЕБАТЕЛЬНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ И ТЕМПЕРАТУРАМИ ПЛАВЛЕНИЯ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Кацюба С.А., Зверева Е.Е.

ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН

Сопоставляя колебательные спектры, рассчитанные в рамках DFT для возможных вариантов структуры ряда ионных жидкостей (ИЖ), с экспериментальными спектрограммами, мы обнаружили, что (i) используемая теоретическая модель корректно описывает поверхность потенциальной энергии (ППЭ) изучаемых систем; (ii) противоионы в этих ИЖ ассоциированы преимущественно попарно; (iii) их колебания практически не смешиваются. Это позволяет рассмотреть данные ИЖ как ансамбли двухатомных ангармонических осцилляторов, состоящих из пар «катион-анион»

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=592>

<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=592>

## СВЯЗЬ СТРОЕНИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ НЕКОТОРЫХ АЗОЛОВ С ИХ УДЕРЖИВАНИЕМ В УСЛОВИЯХ ОБРАЩЕННО-ФАЗОВОГО ВАРИАНТА ВЭЖХ

Сайфутдинов Б.Р., Курбатова С.В., Мешковая В.В.

Самарский государственный университет

В работе изучены закономерности удерживания циклогексил-, фенил-, тиенил-, селенил-замещенных 5-тетразолов, 1,3,4-оксадиазолов и тетразинов, обладающих широким спектром биологической активности, в условиях ОФ ВЭЖХ на октадецилсиликагеле с использованием водно-ацетонитрильных элюентов.

Результаты расчета электронных и структурных характеристик исследованных азолов полуэмпирическим методом РМЗ с полной оптимизацией геометрии молекул использованы для создания модели удерживания этого класса гетероциклов. Расчет величины электронной плотности на гетероатомах показал, что к донорно-акцепторным взаимодействиям с компонентами подвижной фазы способен лишь «пиридиновый» атом азота гетероциклов

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=598>

<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=598>

## СОЗДАНИЕ АНАЛОГОВ ТЕТРАПЕПТИДА ССК-4 НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С АКТИВНЫМ ЦЕНТРОМ ССК<sub>2</sub> РЕЦЕПТОРА

Шульгин С.В., Кузнецов П.Е., Кузнецова Н.Б., Шантроха А.В., Дубас Е.Н.

Саратовский государственный университет

С помощью методов молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов в программе Nucle

Chem 7.1, по частичным экспериментальным данным получены равновесные конформации двух внеклеточных петель рецептора холецистокинин-2 (ССК<sub>2</sub>), сконструирована модель пространственной структуры комплекса активного центра ССК<sub>2</sub> рецептора, состоящего из трёх внеклеточных петель, с лигандом тетрапептидом ССК-4 (Trp-Met-Asp-Phe-NH<sub>2</sub>)

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=633>

<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=633>

## СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ДИССОЦИАЦИИ СВЯЗЕЙ СН ГАЛОГЕНОПРОИЗВОДНЫХ АЛКАНОВ, АЛКЕНОВ И АРЕНОВ

Васильев Е.В., Павлючко А.И.

Волгоградский государственный технический университет

С помощью спектроскопического и квантово-химического методов определена энергия диссоциации связей

СН в галогенпроизводных алканов, алкенов и аренов. Полученные данные позволили выявить закономерности изменения энергии диссоциации связи СН в галогенсодержащих углеводородах

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=629>

<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=629>

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИЕРАРХИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ РЕШЕНИЯ QSAR ЗАДАЧ

Артемченко А.Г., Муратов Е.Н., Волинецкая И.Л., Хромов А.И., Кузьмин В.Е.

Физико-химический институт НАН Украины

Целью настоящей работы явилось сравнение QSAR подходов, разработанных в ФХИ им. А.В. Богатского НАНУ с наиболее популярными из существующих на сегодняшний день их зарубежных аналогов на примере ингибиторов ацетилхолинэстеразы

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=564>

<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=564>

**СТРУКТУРА АДДУКТОВ МОНО- И ДИМЕРОВ ТИОАЛЬДЕГИД-S,S-ДИОКСИДОВ С ТРЕТИЧНЫМИ АЛИФАТИЧЕСКИМИ АМИНАМИ И ПУТИ ИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В РАСТВОРАХ**  
**Лящук С.Н.**

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М.Литвиненко НАН Украины

Путем применения полуэмпирических приближений MNDO, MNDO-d, AM1, PM3 изучены структурные особенности аддуктов триалкиламинов (тримет-тиламин, триэтиламин, хинуклидин) с сульфеном и его димером. Сопоставлением полученных результатов с данными рентгеноструктурного анализа показано, что наиболее точное описание достигается при использовании приближения PM3

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=604><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=604>**СТРУКТУРА АМИНОНИТРИЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИСОЕДИНЕНИЕМ АМИНОВ К А-, В-НЕНАСЫЩЕННЫМ АЛИФАТИЧЕСКИМ НИТРИЛАМ**  
**Демухаммедова С.Д., Ахмедов Р.М.**

Бакинский государственный университет

Настоящая работа посвящена изучению структуры вышеназванных  $\beta$  аминобутиронитрилов и  $\beta$ -аминоизобутиронитрилов. Модели этих аминотрилов исследовались методами теоретического конформационного анализа, колебательной спектроскопии и квантовой химии. Исследование ИК спектров аминотрилов и расчет их электронной структуры полуэмпирическими методами квантовой химии проводились с использованием комплекса программ LEV. Найдены параметры, описывающие теоретические ИК спектры, определены конформационно-чувствительные полосы поглощения. Изучено распределение валентной электронной плотности на атомах модельных аминотрилов и влияние длины заместителя на энергию диссоциации связи N-радикал.

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=574><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=574>**СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ПОЛИХЛОРЗАМЕЩЕННЫХ ДИБЕНЗОЦИКЛОВ****Джалмухамбетова Е.А., Элькин М.Д.**

Астраханский государственный университет

Цель данного сообщения – интерпретация колебательного спектра (PCDD) в ангармоническом приближении, выяснение возможностей ab initio квантовых методов в предсказательных расчетах структуры и спектров полихлорзамещенных дибензо- $p$ -диоксинов

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=578><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=578>**СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ МЕТАЛОРГАНИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ M(MDA)<sub>2</sub> (M=BE, MG, CA, NI; MDA=C<sub>3</sub>O<sub>2</sub>N<sub>3</sub>)****Эрман М.А., Пулин О.В.**

Саратовский государственный технический университет

Для построения структурно-динамических моделей металорганических комплексов M(mda)<sub>2</sub> (плоский шестичленный фрагмент C<sub>1</sub>C<sub>2</sub>O<sub>3</sub>M<sub>4</sub>O<sub>5</sub>C<sub>6</sub> имеет симметрию C<sub>2v</sub>, атомы водорода связаны с атомами углерода.) мы предпочли DFT квантовые методы расчета геометрической структуры, адиабатического потенциала и колебательных спектров сложных молекулярных соединений, надежно зарекомендовавшие себя в многочисленных подобных расчетах соединений различного класса, содержащих шестичленные гетероциклы

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=585><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=585>**СТРУКТУРНО-ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРАГМЕНТОВ ПРИРОДНЫХ ФОТОСИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ В КАРОТИН****Янович М.А., Лобанов А.В., Комиссаров Г.Г.**

Институт химической физики РАН им. Н.Н.Семёнова

В работе исследована стабильность  $\beta$ -каротина (БК) и его способность фотокатализировать распад H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> в моделях каротин-содержащих фрагментов фотосистем, - в комплексах с альбумином (БСА) и в составе мицелл бромида цетилтриметиламмония (ЦТАБ)

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=603><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=603>

**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ПРИЗНАКОВ ОКСИМЕТИЛЬНОЙ ГРУППЫ В ИК СПЕКТРЕ МЕТИЛ-β-D-ГЛЮКОПИРАНОЗИДА****Королевич М.В., Жбанкова М.Р.**

Институт физики им. В.И. Степанова НАН Беларуси

Впервые проведено отнесение наблюдаемых полос поглощения и дана детальная интерпретация ИК спектра метил-β-D-глюкопиранозидов в области 1500-800 см<sup>-1</sup> на основе полного расчета частот и абсолютных интенсивностей нормальных колебаний молекулы и их сопоставления с экспериментальными данными. Выявлены две группы спектральных признаков оксиметильного заместителя гидроксильной группы у атома C<sub>(1)</sub> в глюкопиранозиде: полосы поглощения средней интенсивности, обусловленные характеристическими колебаниями заместителя, и сильные полосы, вызванные своеобразным «взаимодействием» многих структурных фрагментов

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=596><http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=596>**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ КЛАСТЕРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ БОРА С ЭКЗО-ПОЛЕЭДРИЧЕСКИМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ****Нагаев Ю.С., Морозова Т.А., Вотинова Н.А., Жижин К.Ю., Кузнецов Н.Т.**

Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М.В.Ломоносова

Данная работа направлена на подробное изучение применимости квантово-химических расчетных методов, таких как метод Хартри-Фока и метод функционала плотности в варианте B3LYP, к клозо-декаборатному и клозо-додекаборатному анионам, а также к ряду их производных. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных позволило нам выявить ряд оптимальных расчетных методов, позволяющих наиболее точно описать спектральные и геометрические характеристики данного класса соединений

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=617><http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=617>**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ 2-, 4-БРОМ- И 4,4'-ХЛОРБЕНЗОФЕНОНОВ****Успенский К.Е., Бабков Л.М., Давыдова Н.А.**

Саратовский государственный университет

При комнатной температуре измерены колебательные спектры 2-, 4-бром- и 4, 4'-хлорбензофенонов (ББФ и ХБФ). Методом функционала плотности (B3LYP) в базисе 6-31+G(d) с помощью комплекса программ Gaussian'03 [1] построены структурно-динамические модели свободных молекул 2-, 4- ББФ и 4, 4'- ХБФ: рассчитаны энергии, структуры, дипольные моменты, поляризуемости, частоты нормальных колебаний в гармоническом и ангармоническом приближениях и распределение интенсивности в колебательных спектрах молекул

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=567><http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=567>**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ 2-ПИРРОЛИДОНА -ПРЕКУРСОРА ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ И ГОРМОНОВ: ТАУТОМЕРИЯ, ДИМЕРИЗАЦИЯ, КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ С ПАЛЛАДИЕМ(II)****Панкратов А.Н., Чаплыгина О.А., Щавлев А.Е., Бородулин В.Б.**

Саратовский государственный университет

Методами B3LYP, MPW1K и B3PW91 с базисными наборами 6-311++G(d,p) и AUG-cc-pVDZ нами изучены равновесная геометрия и колебательные частоты стабильных конформеров возможных мономеров и водородно-связанных димеров I

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=625><http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=625>**ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ АТОМНЫЕ ЗАРЯДЫ: ПОДХОДЫ К ПОСТРОЕНИЮ СХЕМ РАСЧЕТА****Шульга Д., Олиференко А.А., Палюлин В.А., Зефирова Н.С.**

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

В работе рассматриваются возможные пути к получению эмпирических схем расчета зарядов, отражающих топологию молекулярной структуры. Начиная с построения базовой модели системы, проанализированы два основных способа учета топологической симметрии для атомных зарядов: а) динамическое выравнивание электроотрицательностей (ЭО) и б) поиск зарядов, минимизирующих топологически симметричную функцию энергии системы

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=632><http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=632>

**УЧЕТ ЭНЕРГИИ ПЕРЕСТРОЙКИ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ РАДИКАЛА И ПОНЯТИЕ ЭНЕРГИИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ****Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А.**

Тверская государственная медицинская академия

Предложен метод расчета энергии электронной перестройки в рамках теории атомов в молекулах

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=645>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=645>**ФОТОДЕСТРУКЦИЯ ХЛОРОФИЛЛА В ХИМИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ФОТОСИНТЕЗА****Неврова О.В., Лобанов А. В., Комиссаров Г.Г.**

Институт химической физики РАН им. Н.Н.Семёнова

Химические модели фотосинтеза позволяют изучать структурно-функциональные особенности фотосинтетического аппарата растений. В настоящей работе исследована фотодеструкция хлорофилла в ряде искусственных систем

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=602>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=602>**ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ПИГМЕНТНЫХ СИСТЕМ, МОДЕЛИРУЮЩИХ ФОТОСИНТЕЗ****Наговицын И.А., Щербаков Д.Ю., Чудинова Г.К., Савранский В.В., Ионов Г.В., Ф. А. Сапожников Ф.А., Смирнов Н.А.**

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Исследовано взаимодействие хлорофилла а (ХЛ) и мезотетрафенилпорфирина (ТФП) с  $\beta$ -каротином (КН) в пленках Ленгмюра-Шефера и в комплексе с бычьим сывороточным альбумином (БСА) в водном растворе. Установлено увеличение фотопотенциала в фотоэлектрохимической ячейке в пленках смеси при мольном соотношении ТФП:КН и ХЛ:КН равном 1:4 по сравнению с величинами фотопотенциалов однокомпонентных пленок<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=618>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=618>**ФРАГМЕНТНЫЙ ПОДХОД К QSPR-ОЦЕНКЕ СТАБИЛЬНОСТИ КОМПЛЕКСОВ ВКЛЮЧЕНИЯ НА ПРИМЕРЕ ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ И КРАУН-ЭФИРОВ****Жохова Н.И., Баскин И.И., Бобков Е.В., Палюлин В.А., Зефиоров А.Н., Зефиоров Н.С.**

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Фрагментный подход представляет универсальный прием описания структуры органических соединений при QSPR-моделировании их свойств. В рамках этого подхода с использованием дескрипторов, учитывающих фрагментный состав молекулы, и оригинальных индексов, рассчитываемых на базе комбинаций локальных свойств атомов внутри фрагментов, а также специальных дескрипторов, описывающих макроциклический эффект, осуществлено QSPR-прогнозирование термодинамических характеристик стабильности комплексов "гость-хозяин" на примере свободной энергии образования комплексов органических соединений различных классов с  $\beta$ -циклодекстрином и констант стабильности комплексов  $\text{Na}^+$  и  $\text{K}^+$  с краун-эфирами<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=656>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=656>**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ СВЯЗИ ХАРАКТЕРИСТИК АДСОРБЦИИ И ХРОМАТОГРАФИИ С ЭЛЕКТРОННЫМ СТРОЕНИЕМ МОЛЕКУЛЫ АДСОРБАТА****Долгоносов А.М.**

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

Развит неэмпирический молекулярно-статистический метод расчета константы Генри, использующий связи между структурными характеристиками молекул и их энергетическими, геометрическими и топологическими свойствами, проявляющимися в адсорбции. В отличие от традиционной молекулярно-статистической теории, использующей многочисленные подгоночные параметры для реализации принципа атом-атомных потенциалов, основная идея предложенного подхода заключается в понятии обобщенного заряда молекулярного фрагмента, не подчиняющегося правилу аддитивности

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=580>  
<http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=580>

**ХАРАКТЕРИСТИКИ КОНФОРМАЦИЙ ЗАМЕЩЕННЫХ ЦИКЛОГЕКСАНА****Лямцева О.И., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М.**

Тверской государственной университет

Обсуждаются конформационные характеристики X, XY, XYZ, ... -замещенных циклогексана (X, Y, ... = D, T, F, Cl, CH<sub>3</sub>, ...): вид и число конформаций, их симметрия, статистический вес, разности энергий и др  
<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=627>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=627>

**ЭНЕРГИЯ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ В АТОМ-АТОМНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ****Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н., Папулова Д.Р., Соколов С.А.**

Тверской институт экологии и права

На основе феноменологической концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов (атом-атомное представление) получены рабочие формулы для расчета и прогнозирования энергий разрыва связей

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=653>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=653>

**ЭТОТ ВИРТУАЛЬНЫЙ МОЛЕКУЛЯРНЫЙ МИР****Грибов Л.А.**

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

Объекты молекулярного мира бесконечны по числу и разнообразию свойств. Это позволяет создавать материалы и микросистемы самого разнообразного назначения. Развитие наноустройств и технологий осознаны как главные задачи 21-го века. Очевидно, что целенаправленная работа в наномире лишь на базе ранее установленных правил и вычислительных приемах крайне не эффективна. Прогресс возможен при условии опережающих числовых компьютерных экспериментов. В теории это приводит к необходимости от анализа одиночных объектов и расчета отдельных характеристик и свойств переходить к созданию виртуального молекулярного мира с неограниченным числом объектов, которые могут подобно реальным, отвечать на внешние воздействия, различаться и, наоборот, усложняться при взаимодействиях, накапливать энергию, преобразовывать ис-ходную информацию и т.д.

Обсуждаются перспективы создания такого мира и требования к методологии постановки и решения соответствующих теоретических задач и программостроения

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=587>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=587>

**ЭФФЕКТИВНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОГРАНИЧЕНИЙ ПРИ ГЕНЕРАЦИИ СТРУКТУР В ЭКСПЕРТНОЙ СИСТЕМЕ ПО 2М ЯМР ДАННЫМ****Молодцов С.Г., Блинов К.А., Эляшберг М.Е.**

Новосибирский институт органической химии СО РАН

Задача установления структуры молекул с помощью экспертной системы (ЭС) сводится к наложению структурных ограничений. В результате выделяется одна или несколько структур из очень большого, но конечного числа теоретически возможных изомеров. Ограничения накладываются либо в процессе генерации структур, либо при их фильтрации. Очевидно, наиболее эффективным является первый способ, так как он ведет к подавлению генерации «лишних» структур и сокращению времени генерации. Главным источником структурных ограничений являются 1М (<sup>13</sup>C и <sup>1</sup>H) и 2М ЯМР спектры

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=613>  
<http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper.php?p=613>



# CMPTI-2007

## FOURTH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPUTATIONAL METHODS IN TOXICOLOGY AND PHARMACOLOGY INTEGRATING INTERNET RESOURCES



SEPTEMBER 1-5, 2007

MOSCOW

### Organizers

Federal Agency of Science and Innovation  
Russian Academy of Sciences (RAS)  
Russian Academy of Medical Sciences (RAMS)  
Russian Section of the QSAR and Modelling Society  
Institute of Biomedical Chemistry of RAMS  
Institute of Physiologically Active Compounds of RAS  
NC Group/NVK "VIST"  
Reisebuero WELT

<http://www.ivtn.ru/cmtpi-2007>

**“PROPELLER” CHIRALITY AND SPONTANEOUS RESOLUTION OF TRISTYRYLPHOSPHINE  
CHALCOGENIDES INTO ENANTIOMERS**

**Sukhov B.G., Gubaidullin A.T., Litvinov I.A., Malysheva S.F., Vashchenko A.V., Smirnov V.I., Grigor'eva Yu.A.**  
A.E. Favorsky Institute of Chemistry SB of Russian Academy of Sciences

Chiral compounds are of great fundamental and practical importance. The crystallization of C<sub>3</sub>-symmetric compounds from solution often affords enantiomerically pure single crystals. The present work deals with the detail investigations of spatial structure of tris(E-styryl)phosphine oxide (a), tris(E-styryl)phosphine sulfide (b) and tris(Z-styryl)phosphine oxide (c)...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1093](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1093)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1093](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1093)

**2D QSAR ANALYSIS OF NITROAROMATIC TOXICITY OF THE TETRAHYMENA PYRIFORMIS**  
**Artemenko A.G., Kuz'min V.E., Muratov E.N., Gorb L.G., Qasim M., Leszczynski J.**

Physico-Chemical Institute of the National Academy of Sciences of Ukraine

The present study applies the Hierarchical Technology for Quantitative Structure - Activity Relationships (HiT QSAR) i) to evaluate the influence of the structure of 95 various nitroaromatic compounds (including some widely known explosives) on their toxicity to the ciliate *Tetrahymena pyriformis*; ii) for virtual screening of toxicity of new nitroaromatic derivatives; iii) analysis of the characteristics of the substituents in nitroaromatic compounds as to their influence on toxicity...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1014](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1014)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1014](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1014)

**2D/3D QSAR AND MOLECULAR MODELLING STUDIES OF NEW CLASS OF HIV-1 GP41 INHIBITORS**  
**Teixeira C., Barbault F., Rebehmed J., Maurel F., Fan B.T.**

ITODYS - University Paris 7

Currently, anti-HIV drugs combinations therapies only target HIV-1 protease and reverse transcriptase. Unfortunately, most of these molecules presents numerous shortcomings such as viral resistances and adverse effects. In addition, these drugs are involved to later stages of infection. Therefore, it is necessary to develop new drugs which are able to block the first steps of viral cycle life. A compound, Enfuvirtide, prevents the fusion between the virus and cellular membranes...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=558](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=558)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=558](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=558)

**2D-QSAR STUDIES OF SOME BENZOXAZOLES AGAINST S. AUREUS**  
**Temiz-Arpaci O., Tekiner-Gulbas B., Yildiz I., Aki-Sener E., Yalcin I.**

Ankara University, Faculty of Pharmacy

Benzoxazoles are the structural isosters of natural nucleotides and interact easily with the biopolymers. So that benzoxazoles possess potential antimicrobial and antibiotic activities. In this study, a congeneric set of some benzoxazole compounds 1-19 (Formula 1) were tested for their antibacterial activity against *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 and the QSAR analysis by using Hansch analysis method were studied...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1096](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1096)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1096](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1096)

**3DPL – AN ULTRA-FAST, INTERNET ENABLED PROTEIN-BASED SEARCHING/DOCKING SYSTEM FOR  
BIOLOGISTS AND CHEMISTS**  
**Hurst T.**

ChemNavigator, Inc.

3DPL is an ultra fast protein-based searching/docking system that is designed to find an enhanced number of active molecules from large set of potential ligands. 3DPL uses a protein 3D structure as the query, and can search as many as 30 structures/second on a single CPU, and can thus search about 1,000,000 structures/day/computer. The hits that result from such a search are reproducibly 15-30 times more likely to be active than those randomly selected. Because of the speed of 3DPL's searching technique...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1039](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1039)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1039](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1039)

**3D-QSAR MODELS OF IRREVERSIBLE AND REVERSIBLE INHIBITORS OF ACETYLCHOLINESTERASE****Tikhonova O.V., Skvortsov V.S., Grigor'ev V.Yu., Raevsky O.A.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

It is well known that one of the modes of toxic action is associated with acetylcholinesterase (AChE) inhibition. Irreversible inhibition of AChE leads mainly to acute toxicity of different chemicals, while reversible inhibitors of this enzyme do not exhibit such toxicity and some of them can be even used for the treatment of neurological disorder. The 3D-QSAR models of irreversible and reversible inhibitors that include organophosphorus and carbamate compounds were established...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1098](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1098)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1098](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1098)**A DATABASE SEARCH AND RETRIEVAL SYSTEM FOR THE ANALYSIS AND VIEWING OF BOUND LIGANDS, ACTIVE SITES, SEQUENCE MOTIFS AND 3D STRUCTURAL MOTIFS****Golovin A., Henrick K.**

European Molecular Biology Laboratory-European Bioinformatics Institute

The three-dimensional environments of ligand binding sites have been derived from the parsing and loading of the PDB entries into a relational Macromolecular Structure Database (1). For each bound molecule the biological assembly of the quaternary structure has been used to determine all contact residues and a fast interactive search and retrieval system has been developed. The database was extended with small 3D structural motifs, PROSITE (2) patterns and profiles, Catalytic Sites...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=560](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=560)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=560](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=560)**A DEVELOPMENT OF NEAREST NEIGHBOR METHOD FOR LIPOPHILICITY CALCULATION****Andreeva E.P., Raevsky O.A.**

Institute of Physiologically Active Substances of RAS

8 subsets of chemicals containing diverse compounds with its at least 20 structure relatives (Tanimoto coefficient  $\geq 0.5$ ) were chosen (software MOLDIVS) from the main database of 11514 compounds inclusive experimental logP values (software SLIPPER). The dataset composed of all these subsets (245 compounds) has been formed. In each datasets molecular were calculated (software HYBOT)...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1011](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1011)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1011](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1011)**A GENERAL PHYSICOCHEMICAL QSPR MODELS OF CHEMICALS****PARTITIONING IN SYSTEM SOLVENT-WATER-AIR****Moiseev D.N., Raevsky O.A., Raevskaya O.E., Bovina E.V., Schaper K.-J.**

Institute of Physiologically Active Substances of RAS

Chemicals partitioning in system octanol-water is usually considered as very important parameter for quantitative description of transport processes in biochemical and pharmacological systems. However chemical partitioning in different solvent-water systems where a solvent can have essential other physicochemical parameters compare with octanol may be also useful to construct models of chemicals compounds distribution in systems water-diverse membranes...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1060](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1060)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1060](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1060)**A MULTI-MUTAGENICITY ENDPOINT MODEL BUILT ON TOXICOPHORES****Larsen J., Taboureau O., Jorgensen F.S., Brunak S., Jonsdottir S.O.**

Technical University of Denmark

We have developed a multi mutagenicity model that covers a wide range of mutagenicity endpoints found in the TOXNET database (<http://toxnet.nlm.nih.gov>). It is built upon a core of toxicophores developed by Kazius et al., 2005 for modelling the Ames test. We built the model upon these so-called Ames toxicophores, because the Ames test is a well established assay used in the drug development process, and the mechanisms of action are known to a satisfactory degree. Chemicals or their metabolites may...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1052](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1052)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1052](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1052)

**A QSAR STUDY OF ACUTE TOXICITY TO FATHEAD MINNOW (PIMEPHALES PROMELAS)**

In Y., Lee S.K., Kim P.J., No K.T.

Bioinformatics &amp; MOlecular Design Research Center

The evaluation of toxicity is important to researchers who have many chemicals to test and authorize. Toxicity prediction models provide useful information to these people. We applied several statistical methods of QSARs to fathead minnow acute toxicity (EPAFHM). Multiple linear regression (MLR), artificial neural network (ANN), and preclassification-MLR were adapted to the QSARs for 555 chemicals. The preclassification method was used a recursive partitioning (RP) for classification of simplified mode of action as narcosis and others...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1109](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1109)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1109](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1109)

**A SIMPLE MODEL FOR THE PREDICTION OF BRAIN-BLOOD BARRIER PENETRATION BASED ON 2D AND SUBSTRUCTURAL DESCRIPTORS USING PLS STATISTICS**

Artemenko N.V., James T., Fayne D., Lloyd D.G.

School of Biochemistry &amp; Immunology, Trinity College Dublin

Prediction of various properties tightly connected with ADME/Toxicity plays an increasingly important role in the research projects of many pharmaceutical companies. A knowledge and deep comprehension of complex physiological characteristics is currently very demanding due to the high desirability of novel, and more progressive, medicines for targets which are located in the central nervous system (CNS). In accordance with this view, such a property as blood-brain barrier (BBB) partitioning is determined...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1015](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1015)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1015](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1015)

**A VIRTUAL FILE SYSTEM FOR THE PUBCHEM CHEMICAL STRUCTURE AND BIOASSAY DATABASE**

Ihlenfeldt Wolf-D.

Xemistry GmbH

The PubChem chemical structure and bioassay database ([pubchem.ncbi.nlm.nih.gov](http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov)) has established itself as one of the premier information sources for chemical structures and assay data accessible via the Internet. PubChem provides a convenient interactive Web interface for the execution and result display of standard structure and text-based queries. However, the capabilities for formulating complex queries, and to access and download specific data sets, are limited. Because of the necessity...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=975](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=975)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=975](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=975)

**AB INITIO DOCKING METHOD COMBINING CAVITY SEARCH WITH MOLECULAR DYNAMICS**

Vorobyev Y.N.

Institute of Chemical Biology and Fundamental Medicine, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences

A hierarchical algorithm of ab initio docking of a flexible ligand is developed and implemented. The algorithm combines exhaustive cavity search on protein surface and calculation of docking surface grid with global optimization of ligand positions via molecular dynamics: 1) calculation of a probe accessible surface (PAS) of protein; 2) analysis of the PAS and calculation of a docking surface grid as a virtual positions of accommodation of a probe chemical groups; 3) estimation of the quality score...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=536](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=536)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=536](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=536)

**AIDA: SOFTWARE FOR MODELING OF GLUCOSE-INSULIN INTERACTIONS IN PATIENTS WITH DIABETES MELLITUS TYPE 1**

Sarvilina I., Anna Krishtopa, Yuri Maklyakov, Daria Gordienko

South Scientific Centre of Russian Academy of Science

Diabetes mellitus (DM) is a disease that has been known to exist for thousands of years and that afflicts 6% of the population. DM is a heterogeneous group of diseases, which is characterized high level of the glucose in blood in consequence of defects of insulin secretion, insulin signalizings or their combined defects. Multiple roles of broken regulations in the immune system and inflammatory reactions may play important role in development of DM. Major form of DM is type 1 DM (T1 DM)...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1079](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1079)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1079](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1079)

**ANALYSIS OF PEAK INTENSITY CORRELATIONS TO MAXIMIZE BIOLOGICAL MEANING OF PROTEOME DIAGNOSTIC MASS-SPECTRA****Moshkovskii S.A., Pyatnitsky M.A., Archakov A.I.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

Since 2001, many works have been published that suggest to employ matrix-assisted laser desorption-ionization time-of-flight (MALDI-TOF) mass spectra of easily accessible human biosamples for classification between disease and normal subjects. This field of diagnostic proteomics encompasses disorders, such as cancers and some other chronic life-threatening diseases. In such method, mass-spectrometry peak intensities from each spectrum are used to teach classifier, e.g., genetic algorithm...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=985](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=985)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=985](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=985)**ANALYSIS OF PROCESSING MECHANISM OF HUMAN 8-OXOGUANINE-DNA GLYCOSYLASE ENZYME OF DNA REPAIR SYSTEM****Vorobyev Y.N., Kuznetsov N., Koval V., Fedorova O.**

Institute of Chemical Biology and Fundamental Medicine, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences

Living cells continuously experience a great number of insults from reactive oxygen species that are produced during respiration and generated by UV or ionization radiation.

The effect of oxidative damages to DNA include miscoding and dysregulation of gene expression and may lead to cancer and aging. Base excision repair of damaged bases is initiated by DNA glycosylases, enzymes that recognize lesions and excise the damaged base...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1051](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1051)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1051](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1051)**ANTIINFLAMMATORY AND ANALGESIC ACTIVITY OF NEW DERIVATIVES OF 2-AMINOBENZOTHAZOLE****Kovaleva V.L., Geronikaki A., Proskurina O.V., Shilova E.V., Poroikov V.V., Blinov D.S.**

National Research Center on Biologically Active Compounds

Creating of new drugs with anti-inflammatory (AI) activity including COX-2 inhibitors is still actually because of numerous side effects of NSAID. We studied AI and analgesic properties of 10 new derivatives of 2-aminobenzothiazoles (ABT) on the models of acute exudative inflammation and analgesia using diclofenac, ketoprofen, meloxicam as references drugs. Spectrum of biological activity for tested substances was estimated with computer program PASS (<http://www.ibmc.msk.ru/PASS>)...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1072](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1072)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1072](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1072)**APPLICATION OF SET-ASSOCIATION APPROACH TO SEARCHING FOR SINGLE NUCLEOTIDE POLYMORPHISMS OF "ENVIRONMENTAL GENES" RESPONSIBLE FOR COMPLEX DISEASE SUSCEPTIBILITY****Polonikov A.V., Solodilova M.A., Ivanov V.P.**

Kursk State Medical University

Polymorphisms in genes of xenobiotic-metabolizing enzymes (XME) also known as "environmental genes" are largely responsible for interindividual differences in ability to activate and detoxify chemical agents and therefore may influence individual disease susceptibility. In complex diseases, multiple disease loci presumably interact to produce the pathologic phenotype, and it has been difficult to map susceptibility loci by conventional locus-by-locus methods. Hoh et al. (2001) developed a set association approach (SAA)...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1090](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1090)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1090](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1090)**APPLICATION OF THE NOVEL MOLECULAR ALIGNMENT METHOD USING THE HOPFIELD NEURAL NETWORK TO 3D-QSAR****Funatsu K.**

The University of Tokyo

Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA) has been widely used as a powerful 3D-QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) tool in the field of medicinal chemistry. CoMFA is frequently used as standard QSAR technique, but some problems still remain. The molecular alignment is one of the key problems in QSAR study. In the CoMFA and most other 3D-QSAR techniques, a proper alignment between molecules is necessary. Recently, we investigated and proposed the novel molecular alignment method...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=549](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=549)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=549](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=549)

**APPLICATION OF THE QUANTUM-CHEMICAL ANALYTICAL METHODS TO SUBSTANTIATE THE ANTIRADICAL ACTIVITY IN THE FLAVONE, CHALCONE AND CINNAMIC ACID HYDROXYDERIVATIVE SERIES**

**Agadjanyan V., Oganessian E.**

Pyatigorsk State Pharmaceutical Academy

Reactivity indexes in the series of the cinnamic acid – chalcone – flavone hydroxy derivatives in respect of active oxygen forms have been investigated by semi-empirical quantum – chemical methods (PM3, AM1). The new index – summary unsaturation index was proposed according to the values of the bond orders, bonding numbers and valencies of the appropriate carbon atoms in the structures analyzed. It quantitatively equals to the sum of differences between the valency and the bonding numbers for each carbon atom...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1008](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1008)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1008](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1008)

**ARYLSULFONYLATION OF A-AMINOACIDS: QSAR AND COMPUTER MODELING OF REACTION'S MECHANISM**

**Kochetova L., Scheglova N., Kustova T., Kalinina N.**

Ivanovo State University

Products of arylsulfonylation of amines are widely known in pharmacology as medicines and in enzymology as inhibitors of enzymes. For a few years kinetic characteristics of the reactions of acyl transfer with participation of aminoacids have been investigated by us, their N acylation by chloroanhydrides of aromatic carbonic and sulfoacids, in particular. The data of the precise kinetic experiment allow choosing the descriptors of the molecular structure of reactants for the prediction of their reactivity...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1045](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1045)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1045](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1045)

**ASSESSMENT AND MODELLING OF THE TOXICITY OF SUBSTITUTED AROMATIC COMPOUNDS TO FIVE AQUATIC SPECIES**

**Saçan M.T., Erturk D., Erdem S.S.**

Boğaziçi University-Institute of Environmental Sciences

A previous QSPR study with the toxicity of 39 aromatic compounds to *Scenedesmus obliquus* having strong relationship with the Characteristic Root Index (CRI) and the energy of the lowest unoccupied molecular orbital (ELUMO) [1] encouraged us to search a similar relationship between the same descriptors and the toxicity of substituted aromatic compounds to other five aquatic species: protozoa (*Tetrahymena pyriformis*), bacteria (*Vibrio fischeri*), algae (*Chlorella vulgaris*), daphnid (*Daphnia magna*) and fish (*Poecilia reticulata*)...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1005](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1005)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1005](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1005)

**BANKS OF MODELS AND KNOWLEDGE BASE OF RESULTS SAR - BASIS OF MOLECULAR DESIGN AND PREDICTION**

**Tyurina L.A., Kolbin A., Sementeeva L., Valitov R.**

Scientific-Research technological institute of herbicides and plant growth regulators of herbicides and plant growth regulators

The researches fulfilled on the system SARD and SARD-TOX are carried out as for the conditional structurally related compounds enough and for bioisosteres. Pharmacological and pesticidal types activities (more than 30 types) were investigated. Each researched set included from 40 up to 1000 molecules. Broncholithicals, immunosuppressal, immunostimulational, antioxidant, embryotrophical, antiviral, ulceric, uretonical antihelminthical, herbicidal, fungicidal and etc. types activities are investigated...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1099](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1099)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1099](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1099)

**BIOLOGICAL SPECTRA ANALYSIS: LINKING BIOLOGICAL ACTIVITY PROFILES TO MOLECULAR TOXICITY**

**Fedichev P.O., Vinnik A.A.**

Quantum Pharmaceuticals

Starting from the premise that biological activity including toxicity results from the capacity of small organic molecules to modulate the activity of the proteome, we set out to investigate whether calculated inhibition values could be used for measuring and quantifying toxicity of the molecules. Using a 1,148-small molecule compound database and a diversified set of 476 human protein, we show that inhibition values, determined by in-silico methods, provide a precise molecular property estimation...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=992](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=992)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=992](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=992)

**BRIDGING INVESTIGATIVE TOXICOLOGY AND DISEASE-ORIENTED RESEARCH BY BUILDING A MOUSE-TO-HUMAN PARADIGM****Rusyn I., Hege A.I., Gatti D., Watkins P.B., Threadgill D.W.**

University of North Caroline

Classical toxicology focus is on the dose-response relationships and mode-of-action paradigms. Yet, the effects of many drug and environmental chemical exposures are context dependent, with genetic diversity a major variable that is usually overlooked in safety testing. Recent advances in our basic understanding of the genetic diversity of the human genome, as well as genomes of model organisms used in toxicity and safety assessment testing, not only provide an improved basis for species comparisons...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=983](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=983)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=983](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=983)

**CHARGE-TRANSFER INDICES FOR MULTIFUNCTIONAL AMINO ACIDS****Torrens F., Castellano G.**

Institut Universitari de Ciència Molecular, Universitat de Valencia, Edifici d'Instituts de Paterna

Valence topological charge-transfer (CT) indices are applied to the calculation of pH at the pl isoelectric point. The combination of CT indices allows the estimation of pl. The model is generalized for molecules with heteroatoms. The ability of the indices for the description of molecular charge distribution is established by comparing them with the pl of 21 amino acids. Linear correlation models are obtained. The CT indices improve multivariable regression equations for pl. The variance decreases by 95%...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1100](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1100)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1100](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1100)

**CHEMOINFORMATICS TOOLS FOR PREDICTION OF VARIOUS PROPERTIES OF RELEVANCE TO DRUG DISCOVERY****Jónsdóttir S.Ó., Kouskoumvekaki I., Taboureau O., Hansen N.T., Larsen J., Singh P.**

Technical University of Denmark

The Chemoinformatics Group at CBS, DTU works with the development of new and innovative computational tools for use in drug discovery and lead optimization. The possibility of using computational methods for screening out compounds at an earlier stage can significantly improve the success rate among drug candidates, as many late drug failures due to toxicity and bioavailability factors can thus be avoided...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1040](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1040)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1040](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1040)

**CHEMOMETRIC INVESTIGATIONS OF MULTIDRUG RESISTANCE IN STRAINS OF THE PHYTOPATHOGENIC FUNGUS PENICILLIUM DIGITATUM****Ferreira M.M.C., Kiralj R.**

Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP

Demethylation inhibitor (DMI) resistance by pathogenic fungi is a serious problem in agriculture and medicine. *P. digitatum* (the green mold) causes important postharvest diseases of citrus fruits. The present work studies *P. digitatum* strains (DMI-resistant, moderately resistant and sensitive) and 4 DMIs and 3 non-DMIs by means of Principal Component Analysis (PCA) and Hierarchical Cluster Analysis (HCA) and Partial Least Squares (PLS). Novel types of relationships between toxicant structure and fungal resistance...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1004](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1004)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1004](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1004)

**CISOC-CHIMS: CHEMICAL INFORMATION MANAGEMENT SYSTEM****Shen T., Li F., Yao J.**

Shanghai Institute of Organic Chemistry

Up to now, there is a large of chemical information because of development of chemistry and corresponding specialties. In order to make good use of the information efficiently, it is necessary to manage it by a chemical information management system. ISIS\_BASE is a good and well known product of Elsevier MDL. However, it has a limitation in treatment of Chinese and expression of multi-step reactions in a scheme. Here, we present CISOC-ChIMS, Chemical Information Management System developed by our group...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1084](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1084)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1084](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1084)

**CLASSIFICATION OF ORGANIC COMPOUNDS BY THEIR MODE OF TOXIC ACTION ON DAPHNIA MAGNA BY THREE DIFFERENT METHODS**

**Rasdolsky A.N., Gerasimenko V.A., Filimonov D.A., Poroikov V.V., Weber E.J., Raevsky O.A.**  
Institute of Physiologically Active Substances of RAS

The *Daphnia magna* is the conventional test aqueous organism for assessment of acute toxicity of chemical compounds owing to its high sensitivity to pollutants and to omnipresent prevalence in lakes and rivers. The toxic action of chemical compounds on live aqueous organisms is classified in accordance with a behavioral response of biological organisms to seven types of action: 1) base-line narcosis or narcosis I, 2) polar narcosis or narcosis II, 3) ester narcosis or narcosis III...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1077](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1077)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1077](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1077)

**CLASSIFICATION SAR MODELS OF CHEMICALS TOXICITY TO GUPPY, FATHEAD MINNOW AND RAINBOW TROUT ON THE BASIS OF STRUCTURE SIMILARITY**

**Grigorev V.Yu., Weber E.E., Raevsky O.A.**

Institute of Physiologically Active Substances of RAS

The concept of structure similarity to construct stable predictable models of mode of action (MOA) was applied for training sets of pollutants toxicity to Guppy, Fathead Minnow and Rainbow Trout.

First nearest neighbor (estimated by means of Cosine indexes) was used in one approach to classify MOA of chemicals-of-interest. A probability approach was considered to take a possibility of few MOA for any compound into account. Means maximal Cosine index was applied also to estimate a difference...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1035](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1035)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1035](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1035)

**COMBINATIONAL QSAR MODELING OF CHEMICAL TOXICANTS TESTED AGAINST TETRAHYMENA PYRIFORMIS**

**Tropsha A., Zhu H., Fourches D., Varnek A., Papa E., Gramatica P., Oberg T., Tetko I.**

University of North Caroline

Selecting suitable quantitative structure-activity relationships (QSAR) approaches for a specific toxicity endpoint and accurate toxicity assessment for both drug candidates and environmental chemicals is one of the critical issues in computational toxicology. We have compiled an aqueous toxicity dataset containing 1,093 unique compounds tested in the same laboratory over several years against tetrahyemapyriformis. A modeling set consisting of 644 compounds was randomly selected from the original set...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=997](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=997)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=997](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=997)

**COMFA/COMSIA AND 2D QSAR STUDIES OF DIARYLPYRIMIDINE HIV-1 REVERSE TRANSCRIPTASE INHIBITORS**

**Rebehmed J., Barbault F., Teixeira C., Maurel F., Fan B.T.**

ITODYS - University Paris 7

Nowadays, reverse transcriptase (RT) inhibitors come out to be the first drug class with potent activity against HIV, inhibiting one the first stages in the viral life cycle. NNRTIs (non-nucleoside reverse transcriptase inhibitors) inhibit the enzyme by binding to an allosteric site which is a lipophilic cavity situated at 10Å from the catalytic site. This inhibitor family presents the advantage of high potency, low toxicity and excellent selectivity for HIV-1 RT. Among them, Diarylpyrimidine (DAPY) compounds...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1078](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1078)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1078](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1078)

**COMPARISON OF PSORIASIS AND CROHN'S DISEASE PATHOLOGICAL PROCESSES AT THE LEVEL OF GENE NETWORK INTERACTIONS BY BIOINFORMATICS METHODS**

**Brouskin S.A., Abdeev R.M., Nikolskaya T.A., Piruzian E.S.**

V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian Academy of Sciences

Psoriasis that is a skin disorder, and Crohn's disease that is a damage of bowels epithelium, are complex diseases, which are the consequences of mis-regulation of genetic program. Because of fast development of genomic and postgenomic technologies, and as consequence creating of vast databases of microarrays experiments and scientific publications it is possible to identify now the genes associated with these pathological processes. The

survey was performed with bioinformatics tools...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1022](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1022)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1022](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1022)



**COMPUTATIONAL DESIGN OF ACETYLCHOLINESTERASE INHIBITORS BY FRAGMENT LINKING****Tsareva D.A., Oliferenko A.A., Palyulin V.A., Zefirov N.S.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

Acetylcholinesterase (AChE) has been an important target for decades. Currently the most interesting use of AChE inhibitors is in the treatment of Alzheimer's disease (tacrine, donepezil). The resolved structure of the enzyme exhibits two binding sites: the active one and the peripheral one. It was found experimentally that simultaneous binding to both sites enhances the inhibitory activity very much. The effect is even stronger when two intervening ligands are tied together, or connected to each other with a spacer...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1101](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1101)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1101](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1101)**COMPUTATIONAL DRUG DESIGN BASED ON A NOVEL APPROACH TO LOCAL SIMILARITY OF PROTEIN BINDING SITES****Ramensky V.E., Zaitseva N.I., Rubinov A.R., Zosimov V.V.**

Institute of Molecular Biology Russian Academy of Sciences

We present a novel notion of binding site local similarity based on the analysis of complete protein environments of ligand fragments. Comparison of a query protein binding site (target) against the 3D structure of another protein (analog) in complex with a ligand enables ligand fragments from the analog complex to be transferred to positions in the target site, so that the complete protein environments of the fragment and its image are similar. The revealed environments are similarity regions...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1076](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1076)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1076](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1076)**COMPUTATIONAL STUDY OF ARTEMISININ INTERACTION WITH HEME AND ITS POSTERIOR DECOMPOSITION****Ferreira M.M.C., Pereira M.C.S., Kiralj R.**

Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP

Malaria is still one of the diseases with serious morbidity and mortality statistics worldwide, especially in countries in development. Another problem related to malaria is appearance of multidrug resistance strains of the Plasmodium species, especially of the most mortal P. falciparum. A class of novel substances based on artemisinin is a promising tool in combating malaria. There are sufficient experimental and theoretical evidences to consider that artemisinin interacts with iron from hemoglobin...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1031](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1031)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1031](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1031)**COMPUTER BASED DRUG DESIGN OF LIGANDS FOR CRD DOMAIN OF FRIZZLED RECEPTOR AS PROSPECTIVE ANTICANCER COMPOUNDS****Voronkov A.E., Baskin I.I., Palyulin V.A., Zefirov N.S.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

The Wnt-Frizzled signaling pathway is known to be active in many types of cancer. The inhibition of Wnt-Frizzled signaling pathway in many cases was shown to lead to tumor growth arrest. The interaction of Wnt signaling proteins with Frizzled receptors is conducted through cystein rich domain (CRD) of Frizzled receptor. We have constructed the first models of dimeric CRD-domains of Frizzled receptors and analyzed the binding sites for Wnt protein. The homology modeling method with the use of X-ray structure of CRD domain...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1104](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1104)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1104](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1104)**COMPUTER DESIGN OF LOW-MOLECULAR COMPOUNDS OF A PEPTIDE KIND – ACTIVATORS OF DIRECTIONAL DIFFERENTIATION OF STEM CELLS****Shutova I.V., Mel'nik O.V., Golubovich V.P.**

Institute of Bioorganic Chemistry of National Academy of Sciences of Belarus

The purpose of research is the computer design of low-molecular compounds of a peptide kind – functional centers of human granulocyte colony-stimulating factor (G-CSF) which participate in binding receptors on the surface of hemopoietic stem cells. In order to realize the above aim, a program complex designed by the author was used to provide computer simulation of a protein/receptor interaction and design of low-molecular compounds responsible for biological function of protein...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1086](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1086)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1086](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1086)

**COMPUTER MODELING OF INTERACTIONS BETWEEN HIV-1 INTEGRASE AND STYRYLQUINOLINES****Shcherbinin D., Veselovsky A.V.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

HIV-1 integrase is a very attractive target for new drugs against AIDS because this enzyme controls one of the most important processes in virus lifecycle and has not equivalents in human cells. Nowadays only two compounds are in clinical trial. So, searching for new nontoxic inhibitors of HIV-1 integrase is an issue of the day. In our research behavior of core domain in complexes with its inhibitors and pure domain of integrase has been studied using molecular modeling techniques...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1083](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1083)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1083](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1083)**COMPUTER PREDICTION OF SUBSTRATES, INHIBITORS AND INDUCERS OF CYTOCHROME P450****Dmitriev A.V., Lagunin A.A., Zakharov A.V., Filz O.A., Filimonov D.A., Poroikov V.V.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

CYP2C19, CYP3A4, CYP2D6, CYP2C9, CYP1A2 are the main human cytochrome P450 isoforms important for a xenobiotic metabolism. These isoforms metabolize a plethora of exogenous substances, which are taken by human beings. Inhibition or induction of this isoforms will allow to control drugs biotransformation, and thus to control drugs therapeutic action and side effects. We have collected the information concerning substrates, inhibitors and inducers of cytochrome P450. The database contains structural formulae...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1027](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1027)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1027](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1027)**COMPUTER-AIDED DESIGN OF POLYKETIDES WITH THE REQUIRED PROPERTIES****Sergeiko A., Stepanchikova A., Sobolev B., Zotchev S., Filimonov D., Lagunin A., Poroikov V.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

Polyketides are secondary metabolites with diverse structures and biological activities, thus representing a rich source of potentially valuable pharmacological agents. Polyketides are assembled biosynthetically by the modular polyketide synthase enzymes. The modular polyketide synthase architecture and their mode of action theoretically allow for an enormous number of macrolides to be produced upon combinatorial manipulation with these enzymes.

Engineering of all possible variants of a certain polyketide synthase system...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1080](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1080)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1080](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1080)**COMPUTER-AIDED PREDICTION OF HERG CHANNELS REGULATION****Filz O., Lagunin A., Filimonov D., Poroikov V.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

Acquired Long QT syndrome is defined as a prolongation of QT interval on electrocardiogram leading to the severe abnormality (high risk of fibrillation). One of molecular mechanisms of acquired QT-prolongation is inhibition of potassium (IKr) HERG-channel by pharmaceuticals or their metabolites. IKr channels interact with wide spectra of pharmaceuticals. Recently it has been reported that there are different mechanisms of HERG channels regulation.

Using computer approach, we try to identify which indirect mechanisms might...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1032](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1032)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1032](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1032)**COMPUTER-AIDED PREDICTION OF PROMISING ANTI-TUMOR TARGETS TAKING INTO ACCOUNT INFORMATION ABOUT PROBABLE SIDE EFFECTS****Koborova O.N., Zakharov A.V., Lagunin A.A., Filimonov D.A., Kel A., Kolpakov F.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

One of the challenging problems of oncology is finding of promising anti-tumor targets. The purpose of this study is to identify such targets that give an opportunity to stop the proliferation activity of cancer cells and switch them to apoptosis. On the basis of system biology approaches and mathematical graphs theory we developed the algorithm for estimation of potential targets and created the appropriate computer program. Cell cycle networks and proliferation cascades as well as information...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1044](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1044)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1044](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1044)

**COMPUTER-ASSISTED PREDICTION OF CYTOTOXICITY FOR HIV-1 INTEGRASE INHIBITORS****Drujilovskiy D.S., Filimonov D.F., Lagunin A.A., Glorizova T.A., Poroikov V.V.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

Because of the insufficient safety of known remedies for therapy of HIV infection, finding of new anti-HIV agents with low probability of side/toxic effects is necessary. The purpose of this work is development of computer approach for prediction of cytotoxicity and optimization new integrase inhibitors on this basis. We analyzed the peculiarities of action of known integrase inhibitors and applied the identified structure-activity relationships for search of cytotoxic effects...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1111](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1111)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1111](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1111)**COMPUTER-BASED PREDICTION OF ACTIVITY AND EXPERIMENTAL TESTING OF N-GLYCOSIDES OF SUBSTITUTED INDOLO[2,3-A]CARBAZOLES IN SEARCH FOR NEW ANTITUMOR SUBSTANCES****Apryshko G.N., Golubeva I.S., Gorunova O.V., Yavorskaya N.P., Filimonov D.A., Poroikov V.V.**

N.N.Blokhin Russian Oncological Scientific Center of Russian Academy of Medical Sciences

Computer system PASS version 1.917 (Prediction of Activity Spectra for Substances, (<http://www.ibmcm.sk.ru/PASS>) was used for predicting cytostatic and antineoplastic activities (CA and AA, reference activities in antitumor drug discovery) of several types of N-glycosides of substituted indolo[2,3-a]carbazoles obtained in the chemical laboratory of Russian Cancer Research Center of Russian Academy of Medical Sciences (RCRC RAMS). All substances were evaluated in vitro for effect on tumor cells CaOv, SKOV3, MCF-7...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1012](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1012)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1012](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1012)**COMPUTER-BASED SEARCH FOR NEW ANTITUMOR DRUGS USING THE RCRC RAMS DATABASE ON ANTITUMOR SUBSTANCES****Apryshko G.N., Filimonov D.A., Poroikov V.V.**

N.N.Blokhin Russian Oncological Scientific Center of Russian Academy of Medical Sciences

The computer-based by system PASS (<http://www.ibmcm.sk.ru/PASS>) prediction of antineoplastic activity (AA) was provided for 1694 substances of different chemical classes got from the Database on antitumor substances that was created in Russian Cancer Research Center of Russian Academy of Medical Sciences (RCRC RAMS). For all these substances in the Database there are data on positive or negative results of AA experimental testing obtained in RCRC RAMS laboratories. It was shown that in the case...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1013](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1013)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1013](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1013)**CONSENSUS MODELS AND META-MODELS FOR THE PREDICTION OF LOGP USING NEURAL NETWORKS****Zuaboni D., Cleva C., Carrupt P.-A.**

Merck Serono

Numerous methods have been developed for predicting the logP of compounds from their chemical structure. Most of these methods are based on different approaches and perform differently on different series of compounds. The aim of this project is to combine these different prediction methods in the form of consensus models or meta-models in order to improve the accuracy of prediction compared to a single method. A consensus model takes as input the different results obtained by different prediction models...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=556](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=556)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=556](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=556)**CYCLIN DEPENDENT KINASE (CDK2/CDK4) SELECTIVITY ELUCIDATED BY MOLECULAR DYNAMICS AND QUANTUM CHEMISTRY STUDIES****Barbault F., Li A., Maurel F., Wang B., Fan B.T., Delamar M.**

ITODYS - University Paris 7

Cyclin-dependent kinases (CDKs) are a family of Ser/Thr kinases that play a central role in eukaryotic cell cycle regulation. CDKs have being identified as important targets for therapeutic intervention in cancer and small molecules inhibitors have been identified and reported. Most of them are targeting the CDK4 enzyme but, unfortunately, they also inhibit CDK2 and may cause serious adverse effects. Indeed, CDK4 presents 46% and 72%, respectively, of sequence identity and similarity in comparison to CDK2...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=554](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=554)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=554](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=554)

**CYCLONET – AN INTEGRATED DATABASE AND COMPREHENSIVE TOOL FOR COMPUTATIONAL PHARMACOLOGY**

**Kolpakov F., Poroikov V., Sharipov R., Milanese L., Kel A.**  
Institute for Systems Biology

The aim of the Cyclonet database (<http://cyclonet.biouml.org>) is to develop an integrative approach to help researchers to understand the key processes of cell life - targets of modern pharmacological agents: cell cycle regulation and carcinogenesis - through modeling and simulation of gene regulatory networks. Cyclonet integrates data of genomics, proteomics, chemoinformatics, and systems biology for their use in drug design. Genomics data are represented by 354 categorized links to available microarray experiments...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1046](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1046)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1046](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1046)

**CYTOCHROME P450 KNOWLEDGEBASE FOR DRUG DISCOVERY**

**Lisitsa A.V., Archakov A.I.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

Side effects discovered in many cases withdraw drug candidates from the late phases of discovery process. Some of the side effects can be foreseen at early stages by analysis of the interactions between putative lead and cytochromes P450. As is known these enzymes mediates the biotransformation of over 60% of drugs. While application of SAR, QSAR and other predictive techniques the quality of raw data is of much importance. The statistical analysis case be easily hampered by spontaneous fluctuation...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=976](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=976)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=976](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=976)

**DATABASE OF ENVIRONMENT POLLUTANTS FOR HEALTH RISK ASSESSMENT AND PROGNOSIS OF THE NEW CHEMICAL SUBSTANCE UNKNOWN CHARACTERISTICS**

**Skvortsova N.S., Novikov S.M.**

A.N.Sysin Scientific Institute of Human Ecology and Environmental Hygiene RAMS

Development of the modern databases that support performance of informational, modeling and computational tasks within health risk assessment as well as working out the new methods of prediction the new chemical substance unknown characteristics are important tasks in improving the methodology of health risk assessment. The developed database contains information about 12578 chemical substances and compounds. The information include the following characteristics of a chemical substance...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1087](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1087)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1087](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1087)

**DECISION TREES FOR CLASSIFICATION OF ENDOCRINE DISRUPTORS**

**Panaye A., Devillers J., Doucet J.-P., Marchand-Geneste N., Porcher J.-M.**

ITODYS. University Denis Diderot PARIS 7

With the current concern of limiting experimental assays, increased interest now focuses on in silico models able to predict toxicity of chemicals. Endocrine disruptors cover a large number of environmental and industrial chemicals which may affect the functions of natural hormones in humans and wildlife...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1068](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1068)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1068](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1068)

**DETAILED MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF PROTEIN-LIGAND INTERACTIONS FOR TWO IMPORTANT DRUG TARGETS: CATECHOL-O-METHYL TRANSFERASE (COMT) AND PROLYL OLIGOPEPTIDASE (POP)**

**Bunker A.**

DDTC, Faculty of Pharmacy, University of Helsinki

COMT and POP are both important and mature drug targets, for which several potential inhibitor ligands have been found. These proteins have been successfully crystallized containing a variety of ligands. For the first time long time precise atomistic molecular dynamics calculations have been made. For COMT it has been found that the protein structure present in the crystallized form is partially dependent on the presence of the ADOMET co-enzyme and

Mg<sup>++</sup> ion...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1023](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1023)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1023](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1023)

## DEVELOPMENT OF THE INFORMATION SUBSYSTEM ON MATHEMATICAL MODELS IN TOXICOLOGY AND PHARMACOLOGY

**Ostapchuk R., Zatsepin V., Ivanchenko V.**  
SYSTECH R&D Center

The Integral Chemical Informational Analytical Systems (IAS) developed in SYSTECH R&D Center includes Toxicology Subsystem, which contains multi-aspect documentary-factual information in chemical toxicology region. The development of new subsystem of IAS for aggregating and using of information on published and new created mathematical models for data treatment in toxicology, pharmacology and chemical ecology regions is here considered...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1067](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1067)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1067](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1067)

## E-ENDOCRINE DISRUPTING CHEMICAL DATABASES FOR DERIVING QSAR MODELS

**GMarchand-Geneste N., Devillers J., Dore J.-C., Porcher J.-M.**

LPTC - ISM UMR 5255 CNRS - University Bordeaux 1

There is increasing evidence that numerous chemicals released into the environment by human activities have the potential to alter the normal functions of the endocrine system in wildlife. These xenobiotics, mimicking natural hormones, are called endocrine disrupting chemicals (EDCs). The aim of this study was to catalogue the different EDC database (biological data, chemical descriptor data, etc.) resources available on the Internet for deriving structure-activity models...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=989](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=989)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=989](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=989)

## E-ENDOCRINE DISRUPTING CHEMICAL DATABASES FOR DERIVING QSAR MODELS

**GMarchand-Geneste N., Devillers J., Dore J.-C., Porcher J.-M.**

LPTC - ISM UMR 5255 CNRS - University Bordeaux 1

There is increasing evidence that numerous chemicals released into the environment by human activities have the potential to alter the normal functions of the endocrine system in wildlife. These xenobiotics, mimicking natural hormones, are called endocrine disrupting chemicals (EDCs). The aim of this study was to catalogue the different EDC database (biological data, chemical descriptor data, etc.) resources available on the Internet for deriving structure-activity models...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1055](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1055)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1055](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1055)

## E-EXPERIMENTAL ENDOCRINE DISRUPTOR BINDING ASSAY (E<sup>3</sup>DBA) DATABASE

**GMarchand-Geneste N., Carpy A., Devillers J., Porcher J.-M.**

LPTC - ISM UMR 5255 CNRS - University Bordeaux 1

Due to the abundance of data related to endocrine disruptors present in the environment, the free database "e-experimental endocrine disruptor binding assays" (e<sup>3</sup>dba) was designed to improve and to centralize the flow of information on experimental endocrine disruptor in vitro binding assays on nuclear receptors. It was designed with the aim to evaluate the validity of the existing QSARs and to establish new models. The e3dba database offers numerous interesting functionalities which are presented...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1054](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1054)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1054](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1054)

## EFFECT OF DESCRIPTOR SELECTION: COMPARING LOGD TO LOGP IN DRUG-LIKENESS PROFILING

**Pearl G., Bhal S., Peirson I., Kassam K.**

Advanced Chemistry Development - ACD/Labs

The much-publicised "Rule of 5" has been widely adopted amongst the pharmaceutical industry as the first step in the virtual screening of compound libraries, in an effort to eliminate lead candidates that are deemed to have poor physicochemical properties. Although LogP is a useful descriptor, it fails to take into account any variation in lipophilicity of a drug due to the potential ionisation at a key biological pH. Given that >95% of commercial pharmaceuticals contain an ionisable moiety...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=979](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=979)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=979](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=979)

## EFFECTIVITY OF THE PASS PROGRAM IN PREDICTING OF BIOLOGICAL ACTIVITY FOR SYM-TRIAZINE DERIVATIVES

Mikhaylichenko S.N., Dounin V.V., Zaplishny V.N.  
University of Toronto at Scarborough

Sym-triazine derivatives have a huge spectrum of different biological activity. One of such compounds is the bis-iodomethylate aminoester of sym-triazine acid previously synthesized by one of us...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1059](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1059)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1059](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1059)

## ELECTRON AND SPATIAL STRUCTURE PECULIARITIES OF MACROHETEROCYCLIC COMPOUNDS

Stryapan M., Islyaikin M.

Ivanovo State University of Chemistry and Technology

Macroheterocyclic compounds (Mc) – structural analogs of porphyrin are the objects of great interest as substances with potential biological activity. Geometric characteristics and charges distribution can be used for studying the activity – structure relationships. The DFT method with B3LYP electronic correlation at 6-31G(d,p) basis set (Gaussian03) was applied to study the electron and spatial structure peculiarities of Mc, namely triazoleporphyrazine 1, hemiporphyrazine 2, dicarbohemiporphyrazine 3...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1092](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1092)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1092](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1092)

## ENZYME KINETIC PARAMETER ESTIMATION IN SYSTEMS BIOLOGY USING PROTEIN STRUCTURES

Gabdouline R.R., Stein M., Wade R.C.

University of Heidelberg

The successful modelling of metabolic and signalling pathways in systems biology requires a consistent set of enzymatic kinetic parameters. Sometimes, these parameters are not available from the literature or were obtained under different experimental conditions. Therefore computational methods to estimate these parameters are needed. We are developing simple and computationally efficient procedure to relate protein structural information to enzymatic kinetic parameters...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=541](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=541)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=541](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=541)

## ESTIMATION OF BIOLOGICAL ACTIVITY SPECTRA FOR 2 AMINOTHIAZOLES AND 2-AMINOBENZOTHIAZOLES

Shilova E.V., Kovaleva V.L., Geronikaki A., Blinov D.S., Poroikov V.V., Proskurina O.V.

National Research Center on Biologically Active Compounds

Development of new potent and safety drugs with antiasthmatic, anti-inflammatory (non-steroidal), antiallergic and analgesic activity is important. It is known QSAR methods are useful both in search for a new lead compounds and in development of more active analogs without adverse effects. The spectrum of biological activity of 2-aminothiazoles and 2-aminobenzothiazoles bearing various substituents at 2-amino group and at 4 and 5 positions of cycles was estimated using computer program PASS (<http://www.ibmc.msk.ru/PASS>)...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1019](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1019)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1019](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1019)

## EXPLAIN™: FINDING MOLECULAR MECHANISM OF DISEASE FROM PROMOTER MODELS TO SIGNALING PATHWAYS

Kel A., Voss N., Konovalova T., Stegmaier P., Kel-Margoulis O., Waleev T., Schmitz G.

BIOBASE GmbH

Different signal transduction pathways leading to the activation of transcription factors converge at key molecules that master the regulation of many cellular processes. Such crossroads of signaling networks often appear as "Achilles Heels" causing a disease when not functioning properly. We developed a novel computational tool, ExPlain™ for causal interpretation of gene expression data. It performs a rather unusual way of analysis through considering the earlier causes that have led to the observed...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=982](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=982)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=982](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=982)

**EXPLORATION INTO BIOCHEMICAL PATHWAYS****Gasteiger J., Reitz M., Sacher O.**

University of Erlangen-Nuernberg

Biochemical processes in living organisms are often represented by complicated two-dimensional networks. Finding the desired information, and, in particular, perceiving relationships between individual reactions in such networks can be quite difficult. We have stored the contents of the poster "Biochemical Pathways" originally distributed by Boehringer Mannheim (now Roche) in a reaction database and have enriched it with additional information. The database contains 1,500 structures and 2,200 reactions...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=986](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=986)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=986](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=986)

**EXPRESSION ANALYSIS OF NF-KB-REGULATED GENES IN BREAST CANCER. META-ANALYSIS OF MICROARRAY DATA****Sharipov R., Kondrakhin Yu., Kolpakov F.**

IC&amp;G SB RAS

Increased activity of transcription factor NF- $\kappa$ B was shown to play important part in human cancer development, besides other pathologies like autoimmune diseases, inflammation, and various viral infections. Blocking apoptosis NF- $\kappa$ B induces cell survival and proliferation. Elevated levels of NF- $\kappa$ B were revealed in many types of cancer (including breast cancer) and were often associated with phenomenon of chemotherapy resistance. In such way, NF- $\kappa$ B pathway is the subject of inquiry and targeting with various types of inhibitors...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1082](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1082)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1082](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1082)

**FAST TOOLS FOR CALCULATION OF ATOMIC CHARGES WELL SUITED FOR DRUG DESIGN****Shulga D., Oliferenko A., Pisarev S., Palyulin V., Zefirov N.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

Partial atomic charges have been extensively used in both directly characterizing electrostatic interactions within molecular mechanics (MM) force fields (FF) and estimating various electrostatics related properties by means of scoring functions and descriptors for QSAR/QSPR studies. In many respects the charges that best reproduce ab initio molecular electrostatic potential (MEP) are most advantageous, except the high computational burden they impose due to quantum chemical (QC) calculations...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1085](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1085)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1085](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1085)

**FIELDCHOPPER, MOLECULAR FIELD-BASED VIRTUAL SCREENING METHOD. DESCRIPTION AND EVALUATION****Kalliokoski T., Ronkko T., Poso A.**

Aristotle University of Thessaloniki, Department of Pharmaceutical Chemistry

Virtual Screening (VS) is a routine part of modern drug discovery. Ligand-based VS has been shown to be effective. There are plethora of methods available. Others use single molecule structure as a query while others use a group of molecules for screening. Here we present a 3D-method called FieldChopper (FC) that uses multiple ligands to build a model based on molecular fields which then can be used to screen a molecular database. FC uses electrostatic and Van der Waals molecular fields...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1001](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1001)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1001](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1001)

**FINDING BINDING SITES FOR LOW-MOLECULAR LIGANDS ON THE SURFACE OF C1Q WITH MOLECULAR DOCKING****Karlinsky D.M., Popov M., Kaplun A.P.**

MSAFCT, IBCH

The classical pathway of the complement system activation is triggered by binding of the globular head of first component of complement (C1q) protein to Fc-domains of antibodies IgG or IgM. A range of negatively-charged low-molecular organic compounds can inhibit this interaction and thus be used as drugs to treat such diseases as heart stroke, asthma, Alzheimer's disease, immune conflicts in transplantation, etc. However, the mechanism of these inhibitors' interaction with C1q or antibodies was unknown...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1041](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1041)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1041](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1041)

**FRAGMENTAL DESCRIPTORS IN QSAR MODELS: SELECTION AND INTERPRETATION****Tsygankova I.G.**

Institute of Theoretical and Experimental Biophysics of Russian Academy of Sciences

At present thousands descriptors of molecular structure derived in QSAR and QSPR approaches may be used for model building in drug design. The fragmental molecular descriptors depict a molecule as a system of distinct blocks, corresponding to some atoms, chemical bonds or functional groups. Being simple and representing molecular structure clearly, these descriptors are widely used. In the developed approach based on the fragmental descriptors, QSAR equation is built as a sum of contributions by single fragments of different types...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1102](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1102)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1102](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1102)

**FREE-WILSON STUDY ON SOME MICROBIOLOGICALLY ACTIVE BENZAZOLES****Alper-Hayta S., Yildiz I., Temiz-Arpaci O., Aki-Sener E., Yalcin I.**

Ankara University, Faculty of Pharmacy

The Free-Wilson approach is an application of multiple regression analysis of QSAR methodology. The basic assumption of Free-Wilson analysis is that within a homologous series of drugs, individual segments of molecules make additive and constant contributions to biological activity. If such contributions are known, biological activity can be estimated by simple addition for all the compounds obtainable by any new combination of segments involved. As

Hansch analysis, Free-Wilson analysis can be applied...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1010](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1010)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1010](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1010)

**GENERATION OF NOVEL EQUATION FOR THE LOGALITHMIC RATIO OF THE OCTANOL-WATER  
 PARTITION FUNCTION: LOG P ESTIMATION USING PERCEPTRON TYPE NEURAL NETWORK -  
 DEVELOPMENT OF COMPUTER AIDED MOLECULAR DESIGN SYSTEM: MOLWORKS**

**Nagashima U., Tajima S., Haraguchi M.**

National Institute of Advanced Industrial Science and technology

We have developed a novel property estimation equation with the group contribution scheme for molecular properties: LogP, in the standard condition using a three layers perceptron type neural network and equipped it into

MolWorks™...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1061](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1061)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1061](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1061)

**GRID-SERVICES FOR EVIDENCE-BASED PHARMACOLOGY****Tverdokhlebov N.V., Zhuchkov A., Alperovich B., Kravchenko A.**

N.N.Semenov Institute of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences

Accurate risk assessment and patient safety are among the most valuable goals of information technology in Health Care. A prospective way to reach these goals is to provide medical professionals with complete and actual data about drug usage in clinical practice and this is the subject of evidence-based pharmacology. The problem is that these data are scattered over numerous diverse databases and web-pages. The Grid offers three important technological advantages to overcome this problem by providing...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1103](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1103)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1103](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1103)

**HOMOLOGY MODELING AND COMPUTER-AIDED DESIGN OF HNRNP K MARKER AND LIGANDS IN HEAD  
 AND NECK CANCER**

**Silva C., Silva V.B., Leopoldino A.M.**

University of Sao Paulo

Head and neck cancers (HNC) are a diverse group of diseases, each with its own distinct features, and treatment considerations. Despite improvements in diagnosis, high recurrence and local management, long-term survival rates for patients have not increased significantly over the last years. In this work, we have selected some target proteins in HNC to molecular and structural investigations including hnRNPK protein, which is involved in splicing and cell cycle progression.

In this work we have performed...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=563](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=563)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=563](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=563)



**HYDROGEN BONDING PARAMETRIZATION IN QSAR AND DRUG DESIGN****Raevsky O.A.**

Institute of Physiologically Active Substances of RAS

In spite of all attempts to arrive at a better understanding of the role of water and of hydrogen bonds in biological systems we are far from a satisfactory situation. Analysis of different approaches to characterize hydrogen bonding and its contribution in chemical properties and activity is presented in the report. Different types of H-bond descriptors including indirect H-bond descriptors, indicator variables, two dimensional thermodynamics descriptors, surface H-bond descriptors, distance H-bond potentials are considered...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=993](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=993)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=993](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=993)

**IMPROVING THE PREDICTIVE PERFORMANCE OF AROMATIC AMINE MUTAGENICITY IN DEREK FOR WINDOWS THROUGH THE ANALYSIS OF PROPRIETARY DATA****Naven R., Gibson L., Williams R.V.**

Lhasa Limited

Aromatic amines as a chemical class are widely associated with mutagenicity. Mutagenic potential is often attenuated, however, by structural or physicochemical factors which in practice lead to inactivity in the Ames test. The mutagenicity of aromatic amines is currently described by four alerts in the Derek for Windows (DfW) knowledge base. These alerts have been derived largely on the basis of data from the public domain and have been reported to result in a number of false positive predictions...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=981](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=981)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=981](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=981)

**IN SILICO PREDICTION OF CYP450-MEDIATED METABOLISM PROFILE****Lee S.**

Yonsei University

CYP450 is considered to be the most important single enzyme family in drug metabolism. This superfamily of enzymes is thought to metabolize approximately 90% of all marketed drugs. In this study, we tried three approaches using statistical methods to classify substrate, empirical model to predict the activation energy of CYP450 reaction and combination of docking method and semi-empirical molecular orbital calculations to determine the binding mode of CYP450 enzyme-substrate complex...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1108](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1108)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1108](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1108)

**IN SILICO SCREENING OF ESTROGEN-LIKE CHEMICALS BASED ON QSAR MODELS****Gramatica P., Liu H., Papa E.**

Insubria University, QSAR Research Unit

Increasing concern is shown by the scientific community, regulators, and the public about endocrine-disrupting chemicals (EDCs) that, in the environment, are adversely affecting human and wildlife health through a variety of mechanisms, mainly estrogen receptor-mediated mechanisms of toxicity. Because of the large number of EDCs in the environment, there is a great need for an effective tool of rapidly assessing ED activity in the toxicology assessment process and in the context of the new European REACH policy...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=526](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=526)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=526](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=526)

**INHIBITION OF THE HILL REACTION BY ORGANOPHOSPHORUS INSECTICIDES AND SIMPLE ORGANIC MOLECULES: A QSAR STUDY****Soskic M.**

University of Zagreb, Faculty of Agriculture

In an endeavor to accomplish optimal weed control, with a minimum of ecological damage, numerous QSAR studies have been performed for herbicides inhibiting photosynthetic electron transport in chloroplasts (the Hill reaction). There is no such study dealing with plant-protecting agents (e.g. insecticides) which are not intended to target the plant itself. However, in case of inadequate application, even these compounds can exert phytotoxicity. The main objective of this work was to explore in quantitative terms...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1091](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1091)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1091](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1091)

## INTEGRATED APPROACH TO ASSESS THE DOMAIN OF APPLICABILITY OF SOME COMMERCIAL (Q)SAR MODELS

Kulkarni S.A., Paterson J., Zhu J.  
Health Canada

An integrated approach based on structural analysis to assess the domain of applicability (DA) of some well-known commercial (Quantitative) Structure Activity Relationship ((Q)SAR)-based predictive toxicity models is proposed. The first stage consists in identifying key structural features in a query chemical and determining their coverage in model training sets based on a predefined scale of structural feature representation. In the second stage, using a predefined similarity criterion...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1048](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1048)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1048](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1048)

## INTEGRATED SYSTEM FOR PREDICTION OF THE BIOLOGICAL ACTIVITY, TOXICITY AND PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES

Skvortsov V.S., Lagunin A.A., Filimonov D.A., Raevsky O.A.

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

In this communication we present the new computer system that is uniting a set of our early programs. It includes the features of such programs as HYBOT+/HYBOT 3D, CRATOX, PRETOX, PASS, MedChemDesk, etc. The main purpose of our system is the prediction for wide variety of organic compounds the biological activity spectrum, the side effects, including mechanisms of toxicity, acute toxicity, and a set of physicochemical properties, which are responsible for distribution in environment and living organisms...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1088](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1088)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1088](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1088)

## INTERACTION OF THE ESTROGEN RECEPTOR WITH LIGAND FROM DIFFERENT CHEMICAL CLASSES: 3D-QSAR WITH COMSIA ANALYSIS

Boiko A.V., Veselovsky A.V., Skvortsov V.S., Raevsky O.A.

M.V.Lomonosov Moscow State University

One of the molecular target of the toxic compounds are the nuclear receptors, in particular estrogen, androgen receptors etc. The toxicity based on the interaction of pollutants with these receptors called endocrine toxicity. The detail mechanisms of it are still unknown that limit the adequate prediction of toxicity of endocrine-disrupting chemicals. Using molecular modeling methods we investigate of ability to predict interaction of estrogen binding compounds from different chemical classes with estrogen receptors...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1020](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1020)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1020](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1020)

## INTERNET RESOURCES IN GPCR MODELLING

Saxena A., Alam I., Dixit A., Saxena M.

Central Drug Research Institute

G-Protein coupled receptors (GPCRs) belong to the superfamily of integral membrane proteins characterized by seven transmembrane helix (TM1-TM7). They are encoded by about 5% of the total human genome and comprises 45% of the available drug targets. The three dimensional (3-D) structure of protein is important for drug design. However the progress in solving the GPCR structures has been slow. Out of the 907 human GPCRs reported till date, the 3-D structure has not been solved for any of them using...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=977](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=977)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=977](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=977)

## INTERNET RESOURCES INTEGRATING MANY SMALL-MOLECULE DATABASES

Nicklaus M.C., Filippov I.V., Sitzmann M.

National Cancer Institute

We present new tools and services developed by the CADD Group, NCI, NIH, in the context of our chemoinformatics and drug development work, made available on the CADD Group's web site <http://cactus.nci.nih.gov>. These tools are designed for searching for structures in very large databases of small molecules. One of them is a web service for very rapid structure lookup in an aggregated collection of currently more than 80 databases comprising more than 27 million unique structures...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=974](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=974)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=974](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=974)

**INTERSPECIES RELATIONSHIPS IN THE ACUTE TOXICITY OF XENOBIOTICS****Devillers J., Pandard P., Thybaud E., Merle A.**

Centre de Traitement de Information Scientifique

LD50 tests on rat and mouse are commonly used to express the relative hazard associated with the acute toxicity of new and existing substances. These tests are expensive, time consuming and actively fought by Animal Rightists. Consequently, there is a need to find alternative methods. If the design of QSAR models can be used as surrogate, the search for interspecies correlations also represents a valuable alternative to the classical mammalian laboratory tests. This study investigates quantitatively...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1026](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1026)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1026](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1026)**KNOWLEDGE-BASED POTENTIALS ALLOW PLACEMENT OF WATER AND IONS IN MACROMOLECULAR INTERFACES****Rahmanov S.V., Makeev V.J.**

GosNII Genetika

A new method for calculation of knowledge-based atom contact potentials is proposed. It uses a stochastic scheme for simulating the non-interacting (reference) state for derivation of potentials, thus called Monte Carlo Reference State (MCRS). Due to the use of the MCRS, the resulting potentials are very detailed, continuous, and extend over a broader range of contact distances, including very close contacts. We obtained empirical atomic contact potentials for interaction of all types of protein...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1075](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1075)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1075](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1075)**LIGAND-SPECIFIC SCORING FUNCTIONS: IMPROVED RANKING OF DOCKING SOLUTIONS****Pyrkov T.V., Kosinsky Yu.A., Efremov R.G.**

M.M.Shemyakin and Yu.A.Ovchinnikov Institute of Bioorganic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Molecular docking method has become an integral part of many biomolecular studies aimed at understanding the mechanism of enzyme functioning or drug discovery programmes. Nevertheless, significant challenges related to the problem of proper ranking of docking solutions still remain. While the search algorithms are almost always able to find correct conformation of a ligand in the binding site, the scoring methods often fail to discriminate such a conformation among many false variants...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1074](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1074)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1074](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1074)**MECHANISM BASED COMMON REACTIVITY PATTERN (COREPA) MODELING OF AHR BINDING AFFINITY****Petkov P.I., Serafimova R., Rowlands J.C., Budinsky R., Denison M., Mekenyan O.**

Zlatarov University

The aryl hydrocarbon receptor (AHR) is a ligand-activated transcription factor responsive to both natural and synthetic environmental compounds, with the most potent agonist being 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxin (TCDD or dioxin). Dioxins are a group of environmental contaminants that raise concern because of their widespread presence and persistence. AHR mediates a wide variety of biochemical and toxic effects of these chemicals. While the specific mechanism for these toxic effects is not known...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1000](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1000)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1000](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1000)**MEDICINAL CHEMISTRY AND MATHEMATICS****Zefirov N.S.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

Lecture will consider basic principles of application of discrete mathematics to organic & medicinal chemistry problems. The points will be considered are the following...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1006](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1006)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1006](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1006)

**MFTA-BASED DESIGN OF ACTIVE STRUCTURES**  
**Palyulin V.A., Radchenko E.V., Melnikov A.A., Zefirov N.S.**  
 M.V.Lomonosov Moscow State University

Molecular Field Topology Analysis (MFTA) is a useful approach to QSAR modelling and molecular design of novel promising structures. MFTA model is based on a so-called molecular supergraph – a simple graph such that the molecular graphs of all training set structures can be represented as its subgraphs. Uniform descriptor set for statistical analysis is obtained by superimposing the structure onto the molecular supergraph. Each supergraph vertex is assigned the values of effective atomic charge...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=999](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=999)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=999](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=999)

**MODELING CATALYTIC MECHANISMS OF HYDROLYSIS OF NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATES (NTP)**  
**Shadrina M., Grigorenko B., Nemukhin A.**  
 M.V.Lomonosov Moscow State University

Our work is devoted to the studies of nucleoside triphosphates (NTP) hydrolysis reactions in different biochemical systems. Hydrolysis reactions of NTP are very important for the cell life because small changes in the course of these reactions result in a critical damage of the cell such as a cancerous growth. Detailed mechanisms of these reactions are still not understood. We use an approach to the hybrid quantum mechanical and molecular mechanical (QM/MM) theory based on the effective fragment potential...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1081](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1081)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1081](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1081)

**MODELING THE TOXICITY OF BENZENE DERIVATIVES TO THE TADPOLE (RANA JAPONICA) WITH THE CHARACTERISTIC ROOT INDEX AND SEMIEMPIRICAL MOLECULAR DESCRIPTORS**  
**Erturk D., Sacan M.T.**  
 Boğaziçi University-Institute of Environmental Sciences

A previous QSPR study with the toxicity of 39 aromatic compounds to *Scenedesmus obliquus* having strong relationship with the Characteristic Root Index (CRI) and the energy of the Lowest Unoccupied Molecular Orbital (ELUMO) encouraged us to look for the similar relationship between the same descriptors and the toxicity of benzene derivatives to *Rana japonica*. The 12 h acute toxicity values of 18 compounds used in this study to develop a QSAR model are taken from literature...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1030](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1030)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1030](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1030)

**MODELLING, OPTIMIZATION, AND VARIABLES SELECTION IN QSA(P)R STUDIES. THE ROLE OF COUNTER-PROPAGATION NEURAL NETWORK**  
**Nović M.**  
 National Institute of Chemistry

Counterpropagation artificial neural network (CP ANN) has been often successfully applied in structure-based drug design studies as well as in modelling of adverse molecular properties, i.e. structure-toxicity studies. The characteristics of CP-ANN learning process allows unsupervised clustering of objects (studied molecules) followed by the supervised construction of the response surface. In the first type of applications we developed models for use in prediction of thrombin-inhibitor...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=546](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=546)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=546](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=546)

**MOLECULAR DESIGN OF ANTIOXIDANTS BY SUPERPOSITION OF THEIR EFFICIENCY AND LOW LEVEL OF A TOXICITY**  
**Khayrullina V., Kirilan S., Gerchikov A., Tyurina L., Garifullina G., Kolbin A.**  
 Baskir State University

A mathematical model for prediction of antioxidative activity (AOA) with a recognition level of ~90% was developed using the SARD-21 computer system. Based on this model, structural modification of ionol and 6-methyluracil was carried out. A set including 32 potential antioxidants was generated. The interval levels of toxicity were theoretically predicted and the effect of structural fragments on the toxic properties of the most efficient potential antioxidants was analyzed...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1042](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1042)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1042](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1042)

**MOLECULAR DYNAMICS OF ZERVAMICIN II AND ITS MUTANTS IN DIFFERENT SOLVENTS****Levtsova O.V., Shaitan K.V.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

In present time investigation of antimicrobial peptides, which have activity against gram-positive bacteria, some endo- and exoparasite and cancer cells, is very relevant. Research of these peptides represents a priority questions in biopharmacology. One of these peptides is zervamicin II, a member of the antibiotic peptaibol-family, that is produced by fungi *Emericellopsis*, *Trichoderma*. It consists of 16 amino acids and contains a high proportion of helix-promoting  $\alpha$ ,  $\alpha$ -dialkylated amino acids...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1053](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1053)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1053](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1053)**MOLECULAR INSIGHT INTO THE INTERACTION BETWEEN IFABP AND PA BY USING MM-PBSA AND ALANINE SCANNING METHODS****Zou H., Jiang H.**

Intertek Consumer Goods North &amp; East China

The Molecular Mechanics–Poisson–Boltzmann surface area (MM-PBSA) method combined with alanine-scanning mutagenesis is a very important process for rational drug design. In this study, molecular dynamics (MD) and MM-PBSA were applied to calculate the binding free energy between the rat intestinal fatty acid binding protein (IFABP) and palmitic acid (PA) to gain insight to the interaction details. Equally spaced snapshots along the trajectory were chosen to compute the binding free energy...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=984](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=984)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=984](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=984)**MOLECULAR MODELING OF MEMBRANE PROTEINS – PERSPECTIVE DRUG TARGETS****Efremov R.G.**

M.M.Shemyakin and Yu.A.Ovchinnikov Institute of Bioorganic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Membrane and membrane-active peptides and proteins (MPs) play crucial role in numerous cell processes acting as highly specific and efficient drugs or drug targets. MPs therefore attract growing interest in medicine and biotechnology. Because of experimental difficulties with their structural characterization, essential attention is given now to molecular modeling. Here we review our recent results on computer simulations of different types of MPs (antimicrobial peptides, transmembrane...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=539](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=539)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=539](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=539)**MOLECULAR MODELLING AND MEDICINAL CHEMISTRY OF BIOACTIVE POLYCYCLIC CAGE COMPOUNDS****Oliver D.W., Malan S.F., Carpy A.**

North-West University

Saturated polycyclic hydrocarbon structures such as the monocyclic octane, bicyclic norbornane and tricyclic adamantane has drawn the attention of several research groups since the 1930s. In the 1950s the synthesis of the so called "bird-cage", pentacyclo [5.4.0.0<sup>2,6</sup>.0<sup>3,10</sup>.0<sup>5,9</sup>]undecane-8,11-dione 1 (Scheme 1), also known as Cookson's diketone was reported. This pentacyclic cage diketone is the product of the intramolecular photocyclized Diels Alder adduct of p-benzoquinone and cyclopentadiene...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=555](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=555)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=555](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=555)**MOLECULAR STRUCTURE OF 3-[2-(4-CHLORO-PHENYL)-2-OXO-ETHYL]-5-(2,4-DICHLORO-THIAZOLE-5-YL-METHYLENYL)- THIAZOLIDINE-2,4-DIONE AS ANTIFUNGAL AGENT****Bozdog-Dundar O., Yildiz I.**

Ankara University, Faculty of Pharmacy

In the past 10 years there has been a major expansion in the development of antifungal drugs, but there are still weaknesses in the range and scope of current antifungal chemotherapy. New developments have included the modification of existing drug molecules to eliminate toxicity and improve activity. Therefore, we are also trying to screen the antifungal activity beside antibacterial to be able to luckily discover a new lead compounds...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1021](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1021)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1021](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1021)

**MOLKERN AS NEW EFFECTIVE ENGINE FOR DRUG DISCOVERY SOFTWARE****Fomin E.S., Alemasov N.A., Chirtsov A.S., Fomin A.E.**

The Institute of Cytology and Genetics of Siberian Division of Russian Academy of Sciences

MOLKERN is a template library for all software components required for the analysis, modeling and optimization of spatial macromolecular structures for proteins, cofactors, ligands and their complexes within the force field approximation. Today's computer architecture - hierarchical structure of the memory subsystem, pipelining - is respected by the code to achieve efficient program execution. All algorithms implemented have a linear scaling  $O(N)$  both in memory and time requirements...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1033](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1033)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1033](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1033)**NEW APPROACH OF QUANTITATIVE INTERPRETATION OF DECISION TREE MODELS AND ITS APPLICATION FOR SOLUTION OF QSAR TASKS****Polishchuk P.G., Kuz'min V.E., Artemenko A.G., Makan S.Yu., Andronati S.A.**

Physico-Chemical Institute of the National Academy of Sciences of Ukraine

The decision trees method analysis is one of the most convenient and effective methods of analysis when an investigated property (activity) represented in the rank scale. However it has limited application for solution of QSAR tasks due to difficulties of quantitative interpretation of its models. A new approach to solve this problem was proposed. It is based on the procedure of the trend-vector method. Applying of this approach to the each node of the resulting decision trees model we can estimate...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1070](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1070)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1070](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1070)**NEW IN SILICO STRATEGIES FOR ASSESSING ENVIRONMENTAL CHEMISTRY AND REACH CHALLENGES****Chretien J.R., Pintore M.**

Biochemics Innovation Center

The introduction of REACH system could potentially involve the use of 3.9 million animals for experimental toxicity studies. Simultaneously European regulation to be applied in 2009 implies to stop and/or to reduce drastically animal testing. It prompted us to work within the previous EC DEMETRA Project focused on acute toxicity by using alternative procedure based on [QSAR] [1]. The general aim of CAESAR, a EC financed project under FP6, is then to produce (Q)SAR models for predicting the toxicity...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=550](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=550)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=550](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=550)**NEW INSIGHTS FOR HERG INHIBITION USING MAPPING TECHNIQUES****Balakin K.V., Ekins S., Savchuk N.P., Ivashchenko A.A., Ivanenkov Y.A.**

Chemical Diversity Research Institute

The human ether-ago-go related gene (hERG) can be inhibited by drugs and this may lead to QT prolongation and possibly fatal cardiac arrhythmia. We have collated literature data for 99 diverse hERG inhibitors to generate Kohonen self-organizing maps and Sammon nonlinear maps. These advanced mapping algorithms allow the generation of a two-dimensional image of a multidimensional property space for the analyzed objects, and thus represent powerful tools for visual analysis of the structure-activity relationships...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1003](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1003)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1003](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1003)**NEW MATHEMATICAL MODELS AND SOFTWARE TOOLS FOR COMPLEXITY AND SIMILARITY ANALYSIS OF MOLECULAR GRAPHS****Neznanov A.A., Kokhov V.A., Tkachenko S.V.**

Moscow Power Engineering Institute

The stratified system of mathematical models of structural complexity has been suggested. These models (universal g-model of graph and its submodels) cover wide range of graph properties. Implementation of building and researching of g-models based on the last achievements in the structural spectral analysis of graphs, initially developed by V.A. Kokhov. G-models underlie generalized substructure approach to graphs similarity analysis. G-model is a powerful structural invariant...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1063](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1063)[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1063](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1063)

**NEW PREDICTION SYSTEM FOR MUTAGENICITY: CISOC-PSMT AND ITS APPLICATIONS****Yao J., Liao Q., Shen T., Yuan S.**

Shanghai Institute of Organic Chemistry

The study of prediction of toxicity is very important and necessary because measurement of toxicity is typically time-consuming and expensive. In this work, four kinds of fragments: Atom, Star, Path and Ring, which were generated by the methods described in our former publications acted as descriptors. Recursive Partitioning (RP) method was used to select descriptors. RP and Support Vector Machines (SVM) were used to construct structure-toxicity relationship models, RP model and SVM model, respectively...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=995](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=995)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=995](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=995)**NEW PUBLIC DATA & INTERNET RESOURCES IMPACTING PREDICTIVE TOXICOLOGY****Richard A., Wolf M., Williams-Devane C.-L., Judson R.**

National Center for Computational Toxicology (NCCT)

High-throughput screening (HTS) technologies, along with efforts to improve public access to chemical toxicity information resources and to systematize older toxicity studies, have the potential to significantly improve predictive capabilities in toxicology. Important developments include: 1) large and growing public resources that link chemical structures to biological activity and toxicity data in searchable format, and that offer more nuanced and varied representations of activity...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=973](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=973)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=973](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=973)**NEW STRUCTURAL DESCRIPTORS OF MOLECULES ON THE BASIS OF SYMBIOSIS OF THE INFORMATIONAL FIELD MODEL AND SIMPLEX REPRESENTATION OF MOLECULAR STRUCTURE****Ognichenko L.N., Kuz'min V.E., Artemenko A.G.**

Physico-Chemical Institute of the National Academy of Sciences of Ukraine

In the given work the scheme of calculation of new structural parameters is offered on the basis of symbiosis of the informational field model and simplex presentation of molecular structure. Such structural characteristics can be used for the solution of the different QSAR tasks. In the framework of the information field model every atom depends on influencing of all other atoms of given molecule. Character of such influencing depends on atom properties, fixed in basis of construction of informational field...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1064](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1064)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1064](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1064)**ON GRAPHICAL REPRESENTATION OF PROTEINS AND PROTEIN ALIGNMENT****Randic M.**

National Institute of Chemistry

While graphical representations of DNA were initiated in mid 1985 by Hamori, which was soon followed by Gates, Jeffrey, Nandy and others, the initiation of graphical representations of proteins awaited for another 20 years to finally emerge in 2005. We will outline recent developments on graphical representations of proteins, which were initiated by modifications of the "Chaos Game" approach of Jeffrey for graphical representation of DNA, which also lead to numerical characterizations of the accompanying...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=544](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=544)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=544](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=544)**ONLINE RESOURCE FOR THEORETICAL STUDY OF HYDRATION OF BIOPOLYMERS****Sobolev E.V., Sobolev O.V., Tikhonov D.A.**

Institute of Mathematical Problems of Biology Russian Academy of Sciences

An online resource has been developed for theoretical study of hydration of biopolymers by the method of the integral equations theory of liquids in the RISM (Reference Interaction Site Model) approximation. The RISM method is used to take into account the influence of the solvent and requires less computational effort than the Monte-Carlo and molecular dynamics explicit solvation methods do. At the same time it allows a more thorough and rigorous consideration as compared to implicit solvation models...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1089](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1089)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1089](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1089)

**OPTIMIZING THE USE OF TOXICITY PREDICTION TOOLS ACROSS DRUG DISCOVERY STAGES****Domine D., Cleva C., Seville E., Sauer W., Barbie V., Merlot C.**

Merck Serono

It has now been recognized for long that in silico ADMET (absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity) models are important tools in combating late-stage attrition in the drug discovery process. As a result, a plethora of models has been designed and is now available to monitor and optimize these properties along the development path. In this presentation, some external and internal in silico toxicity models are presented and their optimal use is discussed with respect...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=557](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=557)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=557](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=557)**PBTS SCREENING BY MULTIVARIATE ANALYSIS AND QSAR MODELING****Gramatica P., Papa E.**

Insubria University, QSAR Research Unit

The limited availability of experimental data, necessary for risk assessment of chemicals, and the derived general lack of knowledge of the properties and activities of existing substances has led the European Commission to adopt the REACH (Registration, Evaluation and Authorization of CHemicals) legislation. The high expected cost of REACH has increased the interest on development and validation of alternative methods, such as the Quantitative Structure-Activity Relationships (QSARs), able to predict data and to provide priority lists...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1036](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1036)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1036](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1036)**PHARMACOPHORE ANALYSIS OF TOPOISOMERASE II INHIBITORY ACTIVE BENZAZOLES****Aki-Sener E., Yalcin I., Yildiz I., Temiz-Arpaci O., Zafer B., Tekiner-Gulbas B., Alper S.**

Ankara University, Faculty of Pharmacy

Since the activity of topoisomerases is essential for several cellular processes such as replication, transcription and chromosome condensation, investigation of inhibitory activities of eukaryotic topoisomerases is widely used in anticancer drug development. Their antitumor activity is related to the formation of protein-concealed DNA strand breaks, resulting in the stabilization by the drug of an intermediary complex of the Topo II reaction. These drug-induced cleavable complexes have been proposed...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=998](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=998)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=998](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=998)**PHARMACOPHORE IDENTIFICATION BY DATA MINING****Okada T., Yamakawa M., Fujishima S., Ohmori N.**

Kwansei Gakuin University

Pharmacophore identification is a pending issue, when we have to extract it from a database of drugs with a variety of skeletons. Our current project is to create a knowledge base of pharmacophore for various activities. This presentation shows the methods employed in the pharmacophore identification using an example of dopamine D1 agonist activity...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=562](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=562)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=562](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=562)**PHARMAEXPERT: ESTIMATING DRUG-DRUG INTERACTIONS AND FINDING COMPOUNDS WITH MULTIPLE MECHANISMS OF ACTION****Lagunin A.A., Filimonov D., Glorizova T., Poroikov V.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

On the basis of structural formula of chemical compound, computer program PASS predicts ~2800 kinds of biological activity including ~370 pharmacotherapeutic effects, ~2300 mechanisms of action, ~40 toxic/side effects and ~110 metabolic terms with average accuracy ~93% (<http://www.ibmcm.sk.ru/PASS>). PharmaExpert is the program, which interprets PASS predictions taking into consideration known mechanism-effect(s) and effect-mechanism(s) relationships, and provides a flexible mechanism for selection...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=980](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=980)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=980](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=980)



**PREDICTION OF BIOLOGICAL ACTIVITY VIA INTERNET. MEDICINAL CHEMIST'S POINT OF VIEW****Geronikaki A., Druzhilovsky D., Zakharov A., Poroikov V.**

Aristotle University of Thessaloniki, Department of Pharmaceutical Chemistry

Chemical compounds synthesized in the framework of academic research are considered as a valuable source for discovery of new leads (C&EN, Apr. 16, 2007, p.42). However, being limited in resources, the medicinal chemist from University should apply a rational design in the studies, to obtain molecules with the appropriate pharmacodynamics and pharmacokinetics. Rational design of drug-like compounds is based on computer-aided estimation of different characteristics, including biological activity...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=978](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=978)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=978](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=978)

**PREDICTION OF ENVIRONMENTAL TOXICITIES****No K.T., In Y.Y., Lee S.K., Kim P.J.**

Yonsei University

Prediction of environmental and xenobiotic toxicity is crucial for systematic management of millions of chemicals and for the reduction of drug developing cost by introduction of early stage toxicity prediction. For this purpose, we start to develop an integrated toxicity prediction system that includes both environmental and xenobiotic toxicities. Though the system is in construction, we already have finished some toxicity prediction engines. In the presentation, i) some newly developed descriptors...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=987](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=987)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=987](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=987)

**PREDICTION OF PH-DEPENDENT AQUEOUS SOLUBILITY OF DRUG-LIKE MOLECULES AND DRUG CANDIDATES WITH CHEMOINFORMATICS TOOLS****Kouskoumvekaki I., Hansen N.T., Bjorkling F., Jorgensen F.S., Brunak S., Jonsdottir S.O.**

Center for Biological Sequence Analysis, BioCentrum, DTU

Aqueous solubility and its dependence on the pH of the gastrointestinal tract are key factors that determine the bioavailability of drugs. Thus, reliable computational methods to estimate pH-dependent aqueous solubility of drug-like molecules and drug candidates from their molecular structure would be desirable in the drug design process.

In this work, the Henderson-Hasselbalch equation has been employed, which describes pH-dependent solubility as a function of the intrinsic solubility ( $S_0$ )...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=551](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=551)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=551](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=551)

**PREDICTION OF POLYCYCLIC AROMATIC COMPOUNDS' MUTAGENICITY AND GENOTOXICITY BY QSAR CLASSIFICATION MODELS****Gramatica P., Pilutti P., Papa E.**

Insubria University, QSAR Research Unit

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), absorbed mainly on urban aerosol, are ubiquitous pollutants of high environmental concern. The experimental data of a mutagenicity test on human B-lymphoblastoid cells (alternative to the Ames bacterial test) for a set of 70 oxo-, nitro- and unsubstituted PAHs, detected in particulate matter (PM), were modeled by Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) classification methods (k-NN, k-Nearest Neighbour, and CART, Classification and Regression Tree)...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1037](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1037)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1037](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1037)

**PREDICTION OF PROTEIN-PROTEIN INTERACTIONS: PHYLOGENETIC PROFILES AND CLUSTER ANALYSIS****Pyatnitskiy M.A., Lisitsa A.V., Archakov A.I.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

The advent of whole-genome sequencing has led to computational methods that infer protein function and linkages. One of the most promising approach for prediction of protein-protein structural and functional interactions is studying of phylogenetic profiles. A phylogenetic profile of a protein is a binary vector, representing the presence or absence of homologs to that protein across a set of organisms. It was shown that proteins with similar patterns of occurrence across many organisms...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1073](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1073)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1073](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1073)

**PROGRAM-APPARATUS SOLUTIONS AT ION CHANNEL COMPUTER MODELLING BY THE EXAMPLE OF GABA-A CHANNEL**

**Tereshkina K.B., Shaitan K.V., Tereshkin E.V.**  
M.V.Lomonosov Moscow State University

Currently problems of investigation of molecular design and functioning of ion channels are very relevant. Among various membrane receptor types special attention should be given on ligand-gated ion channels. Mutations in membrane receptors cause various hereditary diseases as epilepsy, Parkinson disease, hyperplexia, cardiac diseases etc. Furthermore, effects of anesthetics are bound to influence on ion channels. Studying of ion migration through receptor channel it is possible to detect...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1097](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1097)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1097](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1097)

**QSAR ANALYSIS OF IMBALANCED TOXICITY DATASETS USING K-NEAREST NEIGHBORS APPROACH**

**Golbraikh A., Zhu H., Wang K., Bell M.W., Tropsha A.**  
University of North Carolina

One of the challenges of modern QSAR analysis especially as applied to toxicity data is building models for imbalanced datasets, i.e., those with uneven distribution of compounds between different classes or categories. Typically, standard QSAR methodologies do not work well when applied to imbalanced datasets. We have developed novel QSAR methodology and software for studies of imbalanced datasets based on k-nearest neighbor methodology. Our approach includes: (i) automatic detection and removal of outliers...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1034](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1034)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1034](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1034)

**QSAR MODELLING OF CARCINOGENICITY FOR REGULATORY USE IN EUROPE**

**Fjodorova N., Novic M., Vracko M.**  
National Institute of Chemistry

In the context of EU legislation, such as REACH and the Cosmetics Directive (Council Directive 2003/15/EC), it is anticipated that (Q)SARs will be used more extensively, in the interests of time- and cost-effectiveness and animal welfare. Many different (Q)SAR models for prediction of properties relevant for chemical management exist, including models for prediction of carcinogenic potency. The models are described in the literature, however, most of them are poorly described in terms of Five principles...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=990](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=990)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=990](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=990)

**QSAR MODELLING OF RAT'S CARCINOGENIC TOXICITY**

**Zaharov A.V., Lagunin A., Filimonov D., Poroikov V.**  
V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

There are more than 70 000 chemicals in use today and many more being synthesized. It is vital that there are efficient methods to assess the effect of these compounds on the environment and on human health. Experimental testing is both time-consuming and expensive, and accordingly, there is a pressing requirement for accurate in silico methods to provide an initial screen that generates alerts for carcinogenic toxicity. The QSAR studies of the environmental fate of chemicals have become a necessary tool...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1106](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1106)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1106](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1106)

**QSAR STUDIES ON A SET OF PYRIMIDINE NUCLEOSIDES AS ANTI HIV-1 AGENTS**

**Barbault F., Hu R., Delamar M., Doucet J.-P., Zhang R.**  
ITODYS - University Paris 7

Quantitative structure-activity relationship (QSAR) studies on a set of pyrimidine nucleosides as antiviral agents for HIV-1 were performed using a comprehensive set of geometrical, electrostatic and quantum-chemical descriptors...  
[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1018](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1018)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1018](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1018)

**QSAR STUDIES USING THE PARASHIFT SYSTEM****Livingstone D.J., Clark T., Hudson B.D., Ford M.G.**

ChemQuest

Following the pioneering work of Corwin Hansch, most QSAR studies consisted of regression models based on substituent constants or topological indices. This began to change with the application of computational chemistry programs to provide molecular descriptors and the use of multivariate statistical methods to build mathematical models. The situation today is that there is a bewildering variety of descriptors that may be used to characterise molecules and a host of mathematical techniques...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=991](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=991)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=991](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=991)

**QSAR STUDY OF ANTHOCYANINS, ANTHOCYANIDINS AND CATECHIN AS INHIBITORS OF LIPID PEROXIDATION****Medic-Saric M., Rastija V.**

Faculty of pharmacy and biochemistry university of zagreb

Catechins, anthocyanidins and their glycoside – anthocyanins, compounds that belong to the natural antioxidant - polyphenols, present in foods of plant origin, are potentially beneficial to human health. Antioxidative effects of those phytochemicals are based on the ability to scavenge different free radicals or the protection of biological molecules against oxidation. In the present study lipid peroxidation inhibitory effect of mentioned polyphenols is correlated with molecular descriptors...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1057](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1057)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1057](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1057)

**QSAR STUDY OF BILITRANSLOCASE TRANSPORT ACTIVITY****Zuperl S., Passamonti S., Novic M.**

National Institute of Chemistry

Bilitranslocase is plasma membrane carrier involved in uptake of diverse organic anions, some phthalate esters and dietary anthocyanins. The latest study showed that, contrary to anthocyanins, most flavonols did not interact with bilitranslocase. In this study a set of endo- and xenobiotics was tested as bilitranslocase inhibitors. The aim was to discover whether bilitranslocase played role in the transport of these, so far unknown ligands, through the cell membrane. We have tested the interaction...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1107](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1107)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1107](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1107)

**QSAR STUDY OF FLAVONOIDS' IMMUNOMODULATORY ACTIVITY****Medic-Saric M., Jasprica I., Debeljak Z., Mornar A.**

Faculty of pharmacy and biochemistry university of zagreb

Flavonoids are a group of phytochemicals ubiquitous in photosynthesizing organisms that display a remarkable array of biochemical and pharmacological activities. As human immune system can be modified by diet, pharmacologic agents, environmental pollutants, it is assumed that certain members of this group of compounds significantly affect the function of the immune system. Using appropriate cell culture model (human macrophage-like cells - differentiated THP-1 cells), the effects of 31 flavonoid...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1056](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1056)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1056](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1056)

**QSAR STUDY ON A SET OF QUINOXALINE COMPOUNDS AS ANTITUBERCULOSIS DRUGS USING THE COUNTER PROPAGATION NEURAL NETWORKS****Vracko M., Bagchi M.C., Nandy S., Gosh P.**

Kemijski institut/National institute of chemistry

A set of 47 quinoxaline compounds and their activities against Mycobacterium tuberculosis expressed as MIC (minimum inhibitory concentration) have been used for QSAR modelling. The structures have been represented with descriptors, which can be classified as constitutional, electrostatic, geometrical, physicochemical and topological ones. As the modelling technique the self organizing maps (SOM) and counter propagation neural networks (CP NN) have been selected, both of the methods have been often used for QSAR modelling...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=545](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=545)  
[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=545](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=545)

**QSRR STUDY OF NITROGEN-CONTAINING BIOLOGICAL ACTIVE HETEROCYCLES****Kurbatova S.V., Kharitonova O.V.**

Samara State University

Quantitative Structure Retention Relationship (QSRR) is the important method for the modeling biochromatographic behaviour of biological active substances and its partition between lipophilic and hydrophilic phases. So high performance liquid chromatography (HPLC) is the most convenient and perspective method for physicochemical properties determination and simulation of chromatographic process which are result of drug leading into the living organism...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1050](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1050)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1050](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1050)

**QUALITY OF COMPUTER-BUILT MODELS OF MEMBRANE PROTEINS ASSESSED VIA KNOWLEDGE-BASED APPROACH****Chugunov A.O., Novoseletsky V.N., Efremov R.G.**

M.M.Shemyakin and Yu.A.Ovchinnikov Institute of Bioorganic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Integral membrane proteins (MP) are pharmaceutical targets of exceptional importance, given e.g. the fact that very significant MP subfamily, G-protein-coupled receptors (GPCR), are targets for >50% of currently marketed drugs. Although availability of spatial structures of MPs is a strong prerequisite for drug design applications, it is currently limited due to imperfection of spatial structure determination techniques. That is why, computational structure prediction methods gain special importance...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1025](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1025)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1025](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1025)

**QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP STUDY OF SELECTIVE LIGANDS FOR THE THYROID HORMONE RECEPTOR B****Gramatica P., Liu H.**

Insubria University, QSAR Research Unit

An accurate and reliable QSAR model of 87 selective ligands for the thyroid hormone receptor beta 1 (TR ) were developed, based on theoretical molecular descriptors to predict the binding affinity of compounds with receptor. The structural characteristics of compounds were described wholly by a large amount of molecular structural descriptors calculated by DRAGON. The built model was fully accessed by various validation methods, including internal and external validation, Y-randomization test...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1038](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1038)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1038](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1038)

**QUANTUM CHEMICAL SIMULATION OF CYTOCHROME P450 CATALYZED AROMATIC OXIDATION: METABOLISM, TOXICITY, AND BIODEGRADATION OF BENZENE DERIVATIVES****Dyachkov P.N., Kharchevnikova N.V., Dmitriev A.V., Kuznetsov A.V., Poroikov V.V.**

N.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry of Russian Academy of Sciences

The dependences of biological oxidation and toxicity of the mono- and multisubstituted benzene derivatives on the nature of substituents are studied using an oxenoid model and the quantum chemical calculations. According to this model, the P450 enzyme breaks the dioxygen molecules and generates the active atomic oxygen species (oxens); these species readily react with substrates. Using MO LCAO MNDO approach, we calculated the differences  $\Delta E$  of the total energies of aromatic compounds and corresponding arene oxides...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1029](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1029)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1029](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1029)

**QUASICRYSTALLINITY OF A LIQUID STATE AS A BASIS FOR CREATING QSPR-MODELS AND DESCRIBING SYNERGIC EFFECTS IN BINARY SYSTEMS****Nikolaev V.F.**

The Institute of Organic and Physical Chemistry Kazan Scientific Center Russian Academy of Sciences

Quasicrystallinity approach to the analysis of pure and binary liquids gives two models. Description of physicochemical constants of pure liquids. The first model based on such molecular characteristics as molecular refraction (MR), dipole moment (m), and molar volume (M/d) is suggested for quantitatively describing molar physicochemical properties F (surface tension, vaporization enthalpy, boiling point, viscosity, etc.) of pure molecular liquids...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=561](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=561)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=561](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=561)

**REACTIVE METABOLISM – QSAR AND QUANTUM CHEMISTRY MODELING****Abramov Y.**

Pfizer Global Research &amp; Development

The cytochrome P450 enzymes may be involved in biotransformation of relatively inert drugs into highly reactive metabolites, commonly referred to as bioactivation. It is recognized that the reactive metabolites can form conjugates with GSH, causing hepatotoxicity. Two independent approaches were used for modeling the bioactivation. A C5.0 QSAR model was implemented for screening purposes. An overall accuracy of the model is reasonably high, 84% for the test set. The quantum chemistry approach was...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=535](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=535)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=535](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=535)**SECONDARY STRUCTURE OF SIGNAL PEPTIDES OF NS2 PROTEIN OF HCV AND ITS STABILITY****Orshanskiy I.A., Tereshkina K.B., Tourleigh Y.V., Shaitan K.V.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

NS2 protein of hepatitis C virus is a transmembrane signal peptide. It plays an important role in cleavage of NS2-3 protein to NS2 and NS3 proteins. NS3 protein is a serine protease, which cleaves all non-structural proteins from polyprotein-precursor. It was shown, that transmembrane localization of NS2 protein is a necessary for NS2-3 protein autocleavage activity. NS2 protein contains four transmembrane domains. Two of them are signal peptides. Research of signal peptides represents a priority questions in biomedicine...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1065](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1065)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1065](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1065)**SMART MINING: A NOVEL TECHNOLOGY FOR ADDRESSING ADME/TOX ISSUES****Balakin K.V., Ivashchenko A.A., Ivanenkov Y.A.**

Chemical Diversity Research Institute

Multivariate data mining techniques can serve as the basis for advanced ADME filters. The scientists at CDRI have developed a software program, Smart Mining, for early evaluation of several important pharmacokinetic parameters including ADME/Tox-related and physico-chemical parameters. This PC-based program can calculate more than 100 different molecular descriptors and model complex molecular properties using non-linear mapping algorithms. Generated models demonstrated good predictive power...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1016](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1016)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1016](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1016)**SOLUTION STRUCTURES AND DYNAMICS OF THE DIHYDROFOLATE REDUCTASE COMPLEXES WITH ANTIBACTERIAL DRUG TRIMETHOPRIM****Kovalevskaya N., Smurnyy Y., Birdsall B., Feeney J., Polshakov V.**

Center for Drug Chemistry

Dihydrofolate reductase (DHFR) catalyses the NADPH-dependent reduction of folate and dihydrofolate to tetrahydrofolate. Since the latter is an important cofactor in the biosynthesis of purines and amino acids, DHFR has proved to be an excellent target for antifolate drugs that act by inhibiting the enzyme in parasitic or malignant cells. The effectiveness of antibacterial drug trimethoprim (TMP) is due to its significantly increased ability of the binding to the bacterial enzyme compared with the vertebrate form...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1047](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1047)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1047](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1047)**SPATIAL DYNAMICS OF THROMBIN GENERATION IN PLASMA****Balandina A.N., Karamzin S.S.**

National Research Center for Hematology

The function of the blood clotting system is the prevention of blood loss during the vascular system integrity damage. Many factors including pharmacological substances influence the clotting system. Even a small change in clotting balance can lead to either bleeding or thrombosis. Thrombin plays a central role in blood coagulation. Investigation of the spatio-temporal thrombin distribution during the clotting is an important pharmacological problem. It will help to obtain significant information...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1017](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1017)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1017](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1017)

**STRUCTURAL-ACTIVITY RELATIONSHIP (SAR), ATOMIC ELECTRON DENSITY AND CONFORMATIONAL INVESTIGATION OF FENTANYL ANALOGUES (FA)**

**Javahery B., Fakhraian H., Nezamoleslam T., Panbehrih M.B.**  
Imam Hossein university

Fentanyl analogues (FA) are highly potent and clinically widely used narcotic analgesic and represent a particular class of  $\mu$  agonist characterized by highly potency, rapid onset and short duration of action. A very large number of

FA have been synthesized, with the aim of establishing SAR and to find clinically more useful drugs with better pharmaceutical profile such as high potency and less side effects (e.g. respiratory depression and lower addiction potential). The most well-known FA are fentanyl...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1002](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1002)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1002](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1002)

**STRUCTURE-ACTIVITY MODELING OF A DIVERSE SET OF ANDROGEN RECEPTOR LIGANDS**

**Devillers J., Doucet J.P., Panaye A., Marchand-Geneste N., Porcher J.M.**  
Centre de Traitement de Information Scientifique

Numerous chemicals released into the environment can interfere with normal, hormonally regulated biological processes to adversely affect development and/or reproductive function in wildlife and humans. Due to the ability of these chemicals to interfere with the endocrine systems, they have been labeled as endocrine disruptors (EDs). SARs and QSARs are powerful screening tools to detect potential EDs and to prioritize them for more intensive and costly evaluations based on in vitro and in vivo assays...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=988](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=988)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=988](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=988)

**STUDY OF PEPTIDE BOND DEFORMATION IN MODEL DIPEPTIDES BY THE SEMIEMPIRICAL QUANTUM CHEMISTRY METHODS**

**Aliev R.E., Demukhamedova S.D., Alieva I.N., Godjaev N.M.**  
Institute for Physical Problems, Baku State University

Quantum chemical calculations for the model dipeptide molecules, composed of L- and D-stereoisomers of arginine and proline amino acids were carried out by the CNDO/2, CNDO/M and MINDO/3 semiempirical methods on the base of the program LEV. The program worked out at the Institute after name of Vernadsky of the Russian Academy of Sciences...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1009](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1009)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1009](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1009)

**SULFONAMIDES AS A SUBJECT TO STUDY MOLECULAR INTERACTIONS IN CRYSTALS AND SOLUTIONS: SUBLIMATION, SOLUBILITY, SOLVATION, DISTRIBUTION**

**Perlovich G.L., Strakhova N.N., Kazachenko V.P., Schaper K.-J., Raevsky O.A.**  
Institute of Physiologically Active Substances of RAS

Sulfonamides are drugs extensively used for the treatment of certain infections caused by Gram-positive and Gram-negative microorganisms, some fungi, and certain protozoa. Although using of antibiotics has diminished the usefulness of sulfonamides, they still occupy a relatively small but important place in the therapeutic resources of physicians. It should be mentioned, that there are some attempts to correlate different physic-chemical characteristics of these compounds with chemotherapeutic activity...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1069](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1069)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1069](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1069)

**SURVEY OF PSORIASIS CANDIDATE GENES BY USING BIOINFORMATICS**

**Abdeev R.M., Brouskin S.A., Nikolskaya T.A., Piruzian E.S.**  
V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian Academy of Sciences

Psoriasis is a complex genetically determined skin disorder that occurs as a consequence of interactions between wide groups (networks) of genes/proteins. The main criterion for searching of genes candidates for pathological process in specific organs and tissues is a significant change in their expression level. The strategy also includes the selection of transcription factors that triggered the change of expression in large gene groups. Up to date, microarrays is a highly throughput and informative tool...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1007](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1007)  
[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1007](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1007)

**SYNTHESIS AND POTENTIAL BIOACTIVITY OF NEW PYRAZOLYL-SYM-TRIAZINE DERIVATIVES****Mikhaylichenko S.N., Dounin V.V., Zaplishny V.N., Chesnyuk A.A.**

University of Toronto at Scarborough

Pyrazole and sym-triazine derivatives possess a wide spectrum of biological activities. It was of our interest to synthesize new compounds containing both of these heterocycles. The synthesis was successfully done using quaternary salts of sym-triazine by following scheme...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1058](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1058)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1058](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1058)**SYSTEMATIC CONFORMATIONAL STUDIES OF NEW POTENTIAL HIV-1 ENTRY INHIBITORS TARGETING CD4-GP120****Teixeira C., Barbault F., Rebhemed J., Urgin K., Serradji N., Heymans F., Maurel F.**

ITODYS - University Paris 7

Attachment of the human immunodeficiency virus (HIV-1) to the cell surface is the first step of the virus cycle. It is accepted that the fusion of the virus membrane with that of the target cell involve the binding of the viral glycoprotein gp120 to the cell receptor CD4. This recognition process induces several conformational changes that lead to the viral penetration in the cell. Therefore, development of entry inhibitors represents an important avenue of drug therapy...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1095](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1095)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1095](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1095)**TEXT MINING TOOLS IN ANALYSIS OF HIGH-THROUGHPUT DATA****Ponomarenko E.A., Lisitsa A.V., Archakov A.I.**

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of Russian Academy of Medical Sciences

The analysis of high-throughput data is the main bottleneck of present-day proteomics. Scientists have to deal with a list of plenty protein names as a result of the experimental chemical compounds in vivo testing. It is rather embarrassing to assign these proteins to the molecular biological process. It is anticipate to allocate the groups of related proteins, which have similar intercellular localization, same metabolic pathway or related function. Such information can be extracted from the different sources...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1071](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1071)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1071](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1071)**THE «MICROCOSM» INFORMATION TECHNOLOGY SYSTEM FOR BIOLOGICAL ACTIVITY PREDICTION OF ORGANIC COMPOUNDS: THE PREDICTION OF HEMORHEOLOGICAL ACTIVITY****Vassiliev P.M., Naumenko L.V., Spasov A.A.**

Volgograd State Medical University

The «Microcosm» information technology system for biological activity prediction of organic compounds is considerate. Its basic theoretical conception, principles of fragmental encoding of compound structure, methods and strategies of activity prediction is put; the packet of special computer programs is described. The examples of effective using of technology for searching of new substances with high hemorheological activity are given. IT «Microcosm» programs system, version 4.2 allows to carry out...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1062](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1062)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1062](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1062)**THE 3D-MODELING, COMPUTER PREDICTION AND EXPERIMENTAL TESTING OF 5-HT<sub>3</sub>-ANTISEROTONIN ACTIVITY OF NEW CHEMICAL COMPOUNDS****Yakovlev D.S., Vassiliev P.M., Poroikov V.V., Filimonov D.A., Spasov A.A., Chernikov M.V., Zheltukhina A.N.**

Volgograd Scientific Center of RAMS

The computer prediction of high level of 5-HT<sub>3</sub>-antiserotonin activity of 175 new derivatives of condensed nitrogen-contained heterocycles was carried out, by joint using of the IT «Microcosm», of the PASS system and of the method of 3D-geometric similarity to standards. Three compounds with high 5-HT<sub>3</sub>-antagonistic activity were found as the result of following experimental testing. At the first step, with applying of IT «Microcosm», on the training set of 98 new experimental investigated substances...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1105](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1105)[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1105](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1105)

**THE GEOMETRICAL APPROACH TO FORECASTING EFFECTIVE NARCOTIC DEPENDENCE REMEDIES****Osipova E., Kuz'min V., Kuz'mina N.**

GosNIIChT

The general 3D-model opiate pharmacophore (OPh) is created on the basis of generalization of experimental data about a parity the agonistic and the antagonistic properties of stereoisomers of ligand's molecules from various structural classes for opiate receptors (OR). It represents the set of molecular areas in which three types of interactions "ligand-receptor" are realized: the agonistic interactions transforming ligand to pure agonist; the antagonistic interactions transforming ligand to the pure...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1066](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1066)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1066](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1066)

**THE INTEGRATED COMPUTER SYSTEM «SARD-TOX–OVOLMEP» FOR DESIGN AND PREDICTION OF CHEMICAL COMPOUNDS WITH AN ESTIMATION OF VARIOUS ASPECTS OF THEIR ACTION****Sementeyeva L.Sh., Tyurina L., Kolbin A., Tyurina O., Solominova T., Kirlan V.**

Ufa State Technical Oil University

The joined system «SARD-TOX–OVOLMEP» to the prediction and design of biologically active compounds) includes three subsystems: 1) computer system of analysis «structure-property» relationship, molecular design and prediction - «SARD-21»; 2) system for prediction of the toxicological characteristics - «SARD-TOX»; 3) system of definition of similarity and difference of molecules on the basis of the quantum-chemical characteristics –

«OVOLMEP». 1. «SARD-21» allows: to estimate the influence...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1110](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1110)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1110](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1110)

**THE ZAGREB APPROACH TO THE STRUCTURE-PROPERTY-ACTIVITY MODELING****Nikolic S., Lucic B., Trinajstic N.**

The Institute Rugjer Boskovic

The Zagreb approach is based on the CROMRsel procedure which is a multivariate procedure that has been designed to select the best possible model among the set of models obtained for a given number of descriptors, the criterion being the standard error of estimate. The nonlinearities also introduced in the set of descriptors by enlarging it with squares and cross-products of initial descriptors. A wide range of descriptors, in their orthogonalized form, is used, including topological indices...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=538](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=538)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=538](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=538)

**THEORY OF PATTERN RECOGNITION IN THE DEVELOPMENT OF THE LOW-TOXIC ANTIINFLAMMATORY DRUGS****Khayrullina V., Mukhametov A., Gerchikov A., Garifullina G., Turina L., Zarudiy F.**

Baskir State University

The ulcerogenic effect from the application of nonsteroid anti-inflammatory drugs (NSAIDs) is caused by the inhibition of the fermentative activity of cyclooxygenase 1 (COX-1), while anti-inflammatory action of NSAIDs is caused by the inhibition of the structural isomer COX-2, whose expression rises in the zones of inflammation. An increase in the selectivity of NSAIDs against to COX-2 will make it possible to decrease their gastrototoxic action and to reach the purpose of the present investigations...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1043](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1043)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=1043](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=1043)

**THREE-DIMENSIONAL COMMON-FEATURE HYPOTHESES AND 2D-QSAR STUDIES ON SOME ANTIMICROBIOLOGICALLY ACTIVE AMIDES AGAINST DRUG-RESISTANCE STAPHYLOCOCCUS AUREUS****Yildiz I., Ertan T., Temiz-Arpaci O., Bolelli K., Aki-Sener E., Yalcin I.**

Ankara University, Faculty of Pharmacy

The dramatically rising prevalence of multi-drug resistant microbial infections in the past few decades has become a serious health care problem. In particular, the emergence of multi-drug resistant strains of Gram-positive bacterial pathogens such as methicillin-resistant Staphylococcus aureus and S. epidermis and vancomycin-resistant Enterococcus is a problem of ever-increasing significance. In order to prevent this serious medical problem, the elaboration of the new types of the previously known drugs is a very actual task...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=996](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=996)

[http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper\\_e.php?p=996](http://www.ivtn.ru/2007/phymath/enter/paper_e.php?p=996)



## **TOWARD BASIC UNDERSTANDING OF THE PARTITION COEFFICIENT LOG P AND ITS APPLICATIONS IN QSAR**

**Chuman H.**

University of Tokushima

The log P value has been the first choice for the molecular hydrophobicity descriptor and in fact it has been widely used in QSAR studies. However, it is still now difficult to understand the partitioning phenomenon in terms of physical chemistry and the physicochemical meaning of log P appeared in enzymatic QSAR equations. In my first topic, an attempt to understand and predict log P is addressed. We formulated a simple model that expressed by two terms, the solvent accessible surface area...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=994](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=994)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=994](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=994)

## **UBIPROT DATABASE AND ANALYSIS OF PROTEIN UBIQUITYLATION FOR APPLICATION IN PHARMACOLOGICAL RESEARCH**

**Gainullin M., Chernorudskiy A., Garcia A., Eremin E., Shorina-Zhabereva A.**

Institute of Applied and Fundamental Medicine, Nizhny Novgorod State Medical Academy

Post-translational protein modification with ubiquitin, or ubiquitylation, has a dramatic impact on diverse cellular processes and is involved in pathogenesis of severe human diseases. Many constituents of ubiquitin-dependent pathway (e.g. enzymes forming ubiquitin conjugating cascade and 26S proteasome) are rated as attractive potential drug targets. In contrast, a wide range of proteins targeted for ubiquitylation is currently out of pharmacologists' interest. This may be due to the lack of systematization...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1024](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1024)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1024](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1024)

## **UNIFIED REPOSITORY OF QSAR MODELS AND MOLECULES – THE SYSTEM OF PROPERTY PREDICTION OF THE CHEMICAL COMPOUND**

**Kumskov M.I., Zefirov N.S., Svitanko I.V., Zaharov A.M., Ponomareva L.A.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

The System enables chemists to uniformly presented QSPR/QSAR models and consistently deliver scientific views of QSPR/QSAR prediction data that are dynamically tailored to the new created models. First system version will used MATLAB 7.1 with Statistics, Database and Fuzzy Logic Toolboxes to design, investigate and store the QSPR/QSAR models. Molecular structure cannot be represented by a unique formal model; several molecular representations can represent the same molecule, depending on the level...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1049](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1049)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1049](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1049)

## **USER CUSTOMIZED MOLECULAR DIVERSITY ANALYSIS USING THE MOLDIA SOFTWARE**

**Doucet J., Maldonado A.G., Petitjean M., Fan B.T.**

ITODYS. University Denis Diderot PARIS 7

Computational query of virtual molecular databases (DB) by chemists, in order to enrich a collection of potentially interesting compounds, is not atypical any more. Everyday, hundreds of molecules are virtually or combinatorially generated, increasing the current data workflow. Tools dealing with the management, the analysis and the retrieval of chemical data in DBs have been developed since few years as an answer to the new demanding needs. User customization of these tools responding to particular...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1028](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1028)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1028](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1028)

## **WEB-ORIENTED SYSTEM KEENBASE FOR NEW DRUGS DESIGN**

**Sulimov A.V., Sulimov V.B., Romanov A.N., Grigoriev F.V., Kondakova O.A.**

Research Computing Center of the Moscow State University

New inhibitors search for a given target-protein is the initial stage of a new drug development. Fast and effective decision of this problem defines minimization of expenses at all following stages and the overall drug development duration. Computer molecular modeling helps to increase new inhibitors elaboration effectiveness. System Keenbase has been developed for this purpose on the base of original programs for docking, scoring, atom typification, filtering of undesirable molecular structures, molecular visualization...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=1094](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=1094)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=1094](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=1094)

**WORKFLOW ENVIRONMENT FOR ESTIMATING BIOLOGICAL EFFECTS****Kos A.**

AKos GmbH

In silico and experimental results are more reliable if generated with different methods. If the results converge, the reliability increases. For instance, carcinogenicity is tested against a variety of cell lines. Predicting active compounds works better when considering a set of biological effects.

Similar, we want to develop a program that predicts reliable biological effects of compounds by using a set of prediction tools and databases. If all the methods converge, we can trust the results...

[http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper\\_e.php?p=559](http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper_e.php?p=559)

[http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper\\_e.php?p=559](http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper_e.php?p=559)

**МАТЕРИАЛЫ, ОПУБЛИКОВАННЫЕ В РАМКАХ  
ИВТН-2007**

**АЛГОРИТМЫ ПОИСКА ОПТИМАЛЬНОГО ЗНАЧЕНИЯ КОМПЛЕКСНОГО ПАРАМЕТРА В  
МОДИФИЦИРОВАННОМ МЕТОДЕ ПРОСТОЙ ИТЕРАЦИИ****Куликов С.П., Волошанюк А.В., Воронина Н.Ю., Сафиулина А.А.**

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

Для некоторых типов конфигураций спектральной области матрицы перехода возможно построение алгоритма поиска. Это такие спектральные области, как круг, комплексный отрезок, треугольник, многоугольник, не содержащие точку 1. Соответственно для классов матриц перехода с такими спектральными областями возможно построение сходящегося ряда оптимальной простой итерации. В частности, для матрицы с положительным спектром (вещественной или комплексной эрмитовой), область

расположения спектра матрицы перехода простой итерации...

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=1112><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=1112>**БИБЛИОТЕКА ПОДПРОГРАММ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ТИПОВ СЛАУ БОЛЬШОЙ РАЗМЕРНОСТИ  
СТАЦИОНАРНЫМИ ИТЕРАЦИОННЫМИ МЕТОДАМИ****Абдель Малик Д.**

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

Численное решение системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) – одна из наиболее часто встречающихся задач линейной алгебры и численных методов в научных и технических исследованиях. Такая задача возникает во многих прикладных дисциплинах, таких как математическая физика (численное решение дифференциальных и интегральных уравнений), экономика, статистика. При этом прикладные задачи часто требуют решения больших и сверхбольших СЛАУ с числом неизвестных более 1000. К таким

СЛАУ, например, приводит...

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=1114><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=1114>**ИТ В ОТЕЧЕСТВЕННОЙ МЕДИЦИНЕ. ВСЕ ЕЩЕ В НАЧАЛЕ ПУТИ?****Лапрун И.Б.**

PC Week/Russian Edition

Несмотря на достижения в разработке и внедрении медицинских информационных систем (МИС), автоматизация отечественных лечебных учреждений до сих пор не получила широкого распространения.

Какие здесь наметились принципиальные подходы, какие новые технологии способствуют развитию процесса, что является тормозом и каковы перспективы - вот неполный перечень вопросов, предложенных нами для обсуждения

<http://www.ivtn.ru/2007/biomedchem/enter/paper.php?p=1116><http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/paper.php?p=1116>

**СОДЕРЖАНИЕ****CONTENTS****ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ  
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУЧНЫХ ПРОБЛЕМ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ ХИМИИ,  
БИОЛОГИИ, ФАРМАЦЕВТИКИ, МЕДИЦИНЫ****ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ  
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ  
ИССЛЕДОВАНИЯХ**

---

**COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL  
AND APPLIED CHEMISTRY, BIOLOGY,  
PHARMACEUTICS AND MEDICINE****COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL  
AND APPLIED PHYSICS****СЕКЦИЯ 1**

Общие проблемы и перспективы использования информационных и компьютерных технологий в науке

**SECTION 1**

General problems and prospects of computer applications in science

**6****СЕКЦИЯ 3**

Моделирование, численные эксперименты

**SECTION 3**

Computer simulation

**7****СЕКЦИЯ 4**

Визуализация в научных исследованиях

**SECTION 4**

Visualization in scientific researches

**13****СЕКЦИЯ 5**

Обработка данных, базы данных, анализ данных

**SECTION 5**

Data processing, databases and data analysis

**15****СЕКЦИЯ 6**

Интеллектуальные системы и технологии (принятие решений, экспертные системы и т.д.)

**SECTION 6**

Intelligence systems and technologies (decision-making, expert system etc.)

**16****СЕКЦИЯ 7**

Оптимальные методы, планирование эксперимента

**SECTION 7**

Optimum procedures and design of experiments

**17****СЕКЦИЯ 8**

Доклады, не вошедшие в основные секции

**SECTION 8**

The reports, which are not included in the basic sections

**18**

---

<b>5-я ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ "МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ"</b>	<b>20</b>
<b>FOURTH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPUTATIONAL METHODS IN TOXICOLOGY AND PHARMACOLOGY INTEGRATING INTERNET RESOURCES</b>	<b>41</b>
<b>МАТЕРИАЛЫ, ОПУБЛИКОВАННЫЕ В РАМКАХ ИВТН-2007</b>	<b>75</b>







## ЗАЯВКА НА УЧАСТИЕ В РАБОТЕ ИВТН-2007

Для принятия участия в работе конференции заполните и направьте, пожалуйста, в оргкомитет ИВТН.ru форму заявки. Тезисы и/или расширенный доклад перешлите по адресу: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru)

Вы можете заполнить эту форму на сайте по адресу: <http://www.ivtn.ru/application.html>

<b>Электронная Конференция</b>	
<b>Фамилия:</b>	
<b>Имя-Отчество:</b>	
<b>Организация:</b>	
<b>Подразделение:</b> (факультет, отдел, лаборатория)	
<b>Должность:</b>	
<b>Ученая степень:</b>	
<b>Телефон:</b>	
<b>Факс:</b>	
<b>E-mail:</b>	
<b>URL:</b>	
<b>Страна:</b>	
<b>Индекс:</b>	
<b>Почтовый адрес:</b>	
<b>Название доклада на русском языке:</b>	
<b>** Название доклада на английском языке:</b>	
<b>Соавторы:</b>	
<b>Тезисы доклада</b> (имя файла):	
<b>* Расширенный доклад</b> (имя файла):	
<b>Краткая аннотация на русском языке</b> (не более 500 символов)	
<b>** Краткая аннотация на английском языке</b> (не более 500 символов)	

\* Призами и дипломами будут отмечены работы участников, приславших расширенные доклады.

\*\* Если у Вас возникнут трудности с переводом, оставьте в данном поле сообщение "трудности с переводом". Наши переводчики решат эту проблему.

Координаты организационного комитета: Тел./Факс: +7 495 995-8017, E-mail: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru)

## IVTN-2007 APPLICATION FORM

For participating in conference you have to send the filled application form to IVTN.ru Organizing Committee.

Your theses and/or enlarged report please send by E-mail: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru).

You can also fill the application form on web-site: [http://www.ivtn.ru/application\\_e.html](http://www.ivtn.ru/application_e.html)

<b>Online Conference</b>	
<b>Surname:</b>	
<b>Name:</b>	
<b>Company/Organization:</b>	
<b>Department:</b>	
<b>Job position:</b>	
<b>Scientific degree:</b>	
<b>Phone:</b>	
<b>Fax:</b>	
<b>E-mail:</b>	
<b>URL:</b>	
<b>Country:</b>	
<b>Zip/Postal Code:</b>	
<b>Postal address:</b>	
<b>** Title of the report:</b> (in Russian)	
<b>Title of the report:</b> (in English)	
<b>Co-authors:</b>	
<b>Theses of the report:</b> (file name)	
<b>* Enlarged report:</b> (file name)	
<b>** Short abstract in Russian</b> (no more than 500 symbols)	
<b>Short abstract in English:</b> (no more than 500 symbols)	

\* The best reports will be awarded with prizes and diplomas, but it concerns only Enlarged Reports.

\*\* If you will have some difficulties with translation, put in this field the message "difficulties with translation". Our translators will decide this problem.

Organizing committee coordinates: Tel./Fax: +7 495 995-8017, E-mail: [org@ivtn.ru](mailto:org@ivtn.ru)

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ  
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ  
Сессия ИВТН-2007**

**COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES  
IVTN-2007 Session**

Сборник материалов  
The Proceedings

**Ответственные за выпуск**

Компьютерная верстка: *Воронина Н.*

Перевод: *Воронина Н.*

Дизайн обложки: *Котельников Д.*

Редактор: *Габусу П.*

**Editorial board**

Make-up: *Voronina N.*

Translators: *Voronina N.*

Design: *Kotelnikov D.*

Editor: *Gabusu P.*

