

**XXIII Российский национальный конгресс
«Человек и лекарство»***

**XXII Симпозиум “Биоинформатика и компьютерное
конструирование лекарств”**

Проводился в Москве, 12-14 апреля 2016 г. Научно-Исследовательским
Институтом

Биомедицинской Химии Имени В.Н. Ореховича

при поддержке

Федерального Агентства Научных Организаций

Спонсор конкурса молодых ученых:

ДАТАТЕХНОЛОГИИ

12 апреля, ИБМХ им. В.Н. Ореховича

Погодинская ул., 10, корп.8, 2-й этаж, конференц-зал

(проезд до ст. метро «Спортивная», далее 20 минут пешком)

ЛЕКЦИЯ
15⁰⁰-16³⁰

Кузнецов В.А.

Bioinformatics Institute, Singapore, Singapore

ВВЕДЕНИЕ В БИОЛОГИЮ R-ПЕТЛЕЙ

13 апреля, ЦМТ*

Центр международной торговли (Краснопресненская наб., 12)

Зеленый зал

12¹⁵-15¹⁵

Председатели: академик Н. С. Зефирин, профессор В. В. Поройков

12¹⁵-12⁴⁵

Худошин А.Г.

Elsevier B.V., Амстердам, Нидерланды

**ПРИМЕНЕНИЕ БАЗ ДАННЫХ REAXYS MEDICINAL CHEMISTRY И PATHWAY
STUDIO ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ МИШЕНЕЙ ДЛЯ ЛЕКАРСТВ НА ПРИМЕРЕ
ШИЗОФРЕНИИ**

12⁴⁵-13¹⁵

Кель А.Э.

ООО «БИОСОФТ.РУ»; ИХБФМ СО РАН, Новосибирск, Россия; geneXplain GmbH,
Вольфенбюттель, Германия

МОДЕЛИРОВАНИЕ ШАГАЮЩИХ ПАССВЕЕВ В СТВОЛОВЫХ КЛЕТКАХ

13¹⁵-13⁴⁵

Кузнецов В.А.

Bioinformatics Institute, Singapore, Singapore

**ДИФФЕРЕНЦИАЦИЯ НА ГЕНОМНОМ И ТРАНСКРИПТОМНОМ УРОВНЕ ДВУХ
ОСНОВНЫХ СИГНАЛЬНЫХ ПУТЕЙ, УПРАВЛЯЮЩИХ РАЗВИТИЕМ
ИНВАЗИВНОГО ПРОТОКОВОГО РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ**

13⁴⁵-14¹⁵

Трибулович В.Г.

СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург, Россия

ПРОБЛЕМАТИКА КОМПЬЮТЕРНОГО КОНСТРУИРОВАНИЯ АМФ-ПОДОБНЫХ

- 14¹⁵-14⁴⁵ **ПРЯМЫХ АКТИВАТОРОВ АМФ-АКТИВИРУЕМОЙ ПРОТЕИНКИНАЗЫ**
Ефремов Р.Г.
ИБХ, Москва, Россия
КЛЕТОЧНЫЕ МЕМБРАНЫ: ОТ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ - К РАЦИОНАЛЬНОМУ КОНСТРУИРОВАНИЮ НОВЫХ НАНООБЪЕКТОВ
- 14⁴⁵-15¹⁵ **Лагунин А.А.**
РНИМУ им. Н.И. Пирогова, ИБМХ, Москва, Россия
QSAR МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗ МЕЖЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

*Для входа в ЦМТ нужен приглашенный билет Оргкомитета Конгресса.

14 апреля, ИБМХ им. В.Н. Ореховича
Погодинская ул., 10, корп.8, 2-й этаж, конференц-зал
(проезд до ст. метро «Спортивная», далее 20 минут пешком)
10⁰⁰-18³⁰

Председатели: В.Г. Туманян, А.В. Веселовский

- 10⁰⁰-10³⁰ **Штайнбрехер Т.Т.**
Schrödinger, Мюнхен, Германия; Уфимский Институт Химии РАН, Уфа, Россия
IN SILICO СКРИНИНГ В РАЗРАБОТКЕ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ
- 10³⁰-11⁰⁰ **Раевский О.А.**
ИФАВ РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия
ЦНС ПРОНИЦАЕМОСТЬ: ИНТУИТИВНЫЕ ПРАВИЛА МЕДИЦИНСКИХ ХИМИКОВ И ХЕМОМЕТРИКА
- 11⁰⁰-11²⁰ **Сулимов В.Б.**
ООО "Димонта"; ИВМ РАН; НИВЦ МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ ДОКИНГ НА ОСНОВЕ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ С ПОМОЩЬЮ ТЕНЗОРНЫХ ПОЕЗДОВ
- 11²⁰-11⁴⁰ **Филимонов Д.А.**
ИБМХ; РНИМУ им. Н.И. Пирогова, Москва, Россия
PASS AFFINITIES ИЛИ ДЕЙСТВИТЕЛЬНО ЛИ НАИВЕН МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ (Q)SAR ОЦЕНОК «NAIVE BAYES»?
- 11⁴⁰-12⁰⁰ **Васильев П.М.**
ВолгГМУ, Волгоград; НИИ ФОХ ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия
КОНСЕНСУСНЫЙ ПОИСК IN SILICO БИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗИМИДАЗОЛА С АНТИДИАБЕТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ
- 12⁰⁰-12²⁰ **Хайруллина В.Р.**
ФГБОУ ВО БашГУ; ФГБУН УФИХ РАН; ФГБОУ ВПО БГМУ, Уфа, Россия
ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ РАЗЛИЧНЫХ КЛАССОВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ВЫРАЖЕННОЙ ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНОЙ И ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТЬЮ
- 12²⁰-12⁴⁰ **Федорова Е.В.**
ООО «ВВС ЛАБ», Санкт-Петербург, Россия
РАЗРАБОТКА ИНГИБИТОРОВ ПРОТЕИНКИНАЗЫ MST1 – ПРЯМОГО РЕГУЛЯТОРА АПОПТОЗА В-КЛЕТОК ПРИ ДИАБЕТЕ 1 И 2 ТИПОВ
- 12⁴⁰-13⁰⁰ **Туманян В.Г.**
ИМБ РАН, МФТИ, ФГУ ГБМСЭ, НИИЯФ МГУ, Москва, Россия
КОЛЛАГЕН И КОЛЛАГЕНОПОДОБНЫЕ БЕЛКИ. РОЛЬ ПОЛИМОРФИЗМА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ И СТРУКТУРЫ В ВОЗНИКНОВЕНИИ ПАТОЛОГИЙ.

13⁰⁰-14⁰⁰

ПЕРЕРЫВ

КОНКУРС МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
Председатели: О.А. Раевский, А.А. Лагунин

- 14⁰⁰-14¹⁵ **Киселева О.И.**
ИБМХ, Москва, Россия
АНАЛИЗ ТРАНСКРИПТО-ПРОТЕОМА ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ АБЕРРАНТНЫХ ФОРМ БЕЛКОВ НА ПРИМЕРЕ КЛЕТОЧНОЙ ЛИНИИ ГЕПАТОЦЕЛЛЮЛЯРНОЙ КАРЦИНОМЫ
- 14¹⁵-14³⁰ **Конова В.И.**
ИБМХ; РНИМУ им. Н.И. Пирогова, Москва, Россия
ВЕБ-СЕРВИС ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ЦИТОТОКСИЧНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В ОТНОШЕНИИ ОПУХОЛЕВЫХ И НЕОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОЧНЫХ ЛИНИЙ ЧЕЛОВЕКА
- 14³⁰-14⁴⁵ **Кузнецов А.С.**
ИБХ РАН, Москва, Россия
ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ МУТАЦИЙ НА ДИМЕРИЗАЦИЮ ТРАНСМЕМБРАННЫХ ДОМЕНОВ БЕЛКОВ (НА ПРИМЕРЕ ГЛИКОФОРИНА А)

- 14⁴⁵-15⁰⁰ **Гайдай И.О.**
ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
АЛГОРИТМ ПОИСКА ПЕРЕХОДОВ В КОНФОРМАЦИОННЫХ ЛАНДШАФТАХ БЕЛКОВ
- 15⁰⁰-15¹⁵ **Щербинин Д.С.**
ИБМХ; МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТОЧЕЧНЫХ АМИНОКИСЛОТНЫХ ЗАМЕН В ПОЛОЖЕНИЯХ 182 И 39 НА ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ БЕТА-ЛАКТАМАЗ ТЕМ ТИПА МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
- 15³⁰-15⁴⁵ **Замалетдинов М.Ф.**
ИБХ РАН, Москва, Россия
ИЗУЧЕНИЕ ДИМЕРИЗАЦИИ ТРАНСМЕМБРАННЫХ ДОМЕНОВ ТИРОЗИНКИНАЗ СЕМЕЙСТВА РЕЦЕПТОРА ИНСУЛИНА IN SILICO
- 15⁴⁵-16⁰⁰ **Панина И.С.**
ИБХ, Москва, Россия
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛАНТИБИОТИКА НИЗИН С ЕГО МИШЕНЬЮ В БИОМЕМБРАНЕ
- 16⁰⁰-16¹⁵ **Ворфоломеева В.В.**
ВолгГМУ; ВПИ ВолгГТУ, Волгоград, Россия
ПОИСК ИНГИБИТОРОВ РЕАКЦИИ МАЙЯРА МЕТОДОМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЯ

16¹⁵-16³⁰

ПЕРЕРЫВ

КОНКУРС МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

Председатели: П.М. Васильев, Д.А. Филимонов

- 16³⁰-16⁴⁵ **Яналиева Л.Р.**
ВолгГМУ, Волгоград, Россия
ФАРМАКОФОРНЫЙ ПОИСК РАЗРЫВАТЕЛЕЙ СШИВОК ГЛИКИРОВАННЫХ БЕЛКОВ
- 16⁴⁵-17⁰⁰ **Никитина А.А.**
МГУ им. М.В. Ломоносова, ИПВЭ им. М.П. Чумакова, Москва, Россия
СОЗДАНИЕ ВЫСОКОКАЧЕСТВЕННОЙ АННОТИРОВАННОЙ БИБЛИОТЕКИ СОЕДИНЕНИЙ, ТЕСТИРОВАННЫХ НА ПРОТИВОВИРУСНУЮ АКТИВНОСТЬ
- 17⁰⁰-17¹⁵ **Дмитриев А.В.**
ИБМХ; РНИМУ им. Н.И. Пирогова, Москва, Россия
ПРОГНОЗ ПОЛОЖЕНИЯ РЕАКЦИЙ ПЕРВОЙ И ВТОРОЙ ФАЗЫ МЕТАБОЛИЗМА КСЕНОБИОТИКОВ
- 17¹⁵ – 17³⁰ **Васильев М.Н.**
ФГБОУ ВО; ФГБОУ ВПО БГМУ, Уфа, Россия
QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ВЫРАЖЕННОЙ НООТРОПНОЙ АКТИВНОСТЬЮ
- 17³⁰ – 17⁴⁵ **Гордеева В.Д.**
МФТИ (ГУ), Долгопрудный; ИПВЭ, Москва, Россия
ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ ИНГИБИТОРОВ ПРОТЕИНКИНАЗЫ PKNB MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS НА ОСНОВЕ ДОКИНГА В АНСАМБЛЬ СТРУКТУР
- 17⁴⁵ – 18⁰⁰ **Карасев Д.А.**
ИБМХ, РНИМУ им. Н.И. Пирогова, Москва, Россия
ОПРЕДЕЛЕНИЕ АМИНОКИСЛОТНЫХ ОСТАТКОВ ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ СЕЛЕКТИВНОСТЬ ИНГИБИТОРОВ К ПРОТЕИНКИНАЗАМ ЧЕЛОВЕКА
- 18⁰⁰ – 18¹⁵ **Соснина Е.А.**
МГУ им. М.В. Ломоносова, ФГБНУ ИПВЭ им. М.П. Чумакова, Москва, Россия
ВЛИЯНИЕ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ДЕСКРИПТОРОВ НА МУЛЬТИПАРАМЕТРИЧЕСКУЮ ОЦЕНКУ ТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА СОЕДИНЕНИЯ
- 18¹⁵ – 18³⁰ **Бершвили В.П.**
МГУ, Москва, Россия
МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН МУЛЬТИТАРГЕТНЫХ ИНГИБИТОРОВ ТАНКИРАЗЫ И ФОСФОИНОЗИТИД-3-КИНАЗЫ

***Программа конгресса представлена на веб-сайте:
<http://chelovekilekarstvo.ru/conf2016/>**