

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
ПРОБЛЕМ И
ПРИКЛАДНЫХ
НАУЧНЫХ ЗАДАЧ



COMPUTER
APPLICATIONS
IN SCIENTIFIC RESEARCHES

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
ИВТН-2006**

PROCEEDINGS of
the IVTN-2006

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-2006

The Organizing committee thanks all of the participants of the IVTN-2006 session

В сборнике материалов сессии ИВТН-2006 представлены аннотации докладов 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". 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-2006 session include the annotations of the reports participated in the conferences "Computer Applications in Chemistry, Biology, Pharmaceutics and Medicine" and "Computer Applications in fundamental and applied Physics and Mathematics". Different scientific researches, achievements and computer applications examples are discussed in these reports.

© NC Group / НБК «Вист»

© NC Group / NVK «VIST»



Библиотека ИВТН-2006

[Вернуться назад](#)

AB INITIO - исследование влияния сольватации на реакционную способность метилэтилкетона в реакции продолжения цепи	Дмитрук А.Ф., Заречная О.М., Опейда И.А.		Тезисы
Самосогласованный расчет равновесного распределения частиц в трех агрегатных состояниях	Товбин Ю.К.		Тезисы
Автоматизированные методы обработки и анализа данных по свойствам веществ в базе данных "ОРГАНИКА"	Богомольный А.М., Круковская Н.В.		Тезисы
Активность эрдистероидов в биотестах, искусственных (компьютерных) моделях и живых системах	Тимофеев Н.П.	Расширенный доклад	Тезисы
Алгоритмизация вычисления оценок многомерных интегралов с помощью ПЛП-поиска	Статников И.Н., Фирсов Г.И.	Расширенный доклад	Тезисы
Анализ вторичных структур белков Т-комплекса с помощью различных программ	Чумаков М.И.		Тезисы
Анализ некоторых возможностей построения радиологических изображений с помощью скрещенных решеток	Артемова Т.К., Артемова О.К.	Расширенный доклад	Тезисы
Ангармонизм колебательных состояний многоатомных органических молекул, вычислительные и прикладные аспекты	Дементьев В.А.	Расширенный доклад	Тезисы
Анизотропия продольного и поперечного транспорта в монокристаллах $\text{HoBa}_{2-x}\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$	Вовк Р.В., Оболенский М.А., Завгородний А.А., Бондаренко А.В.	Расширенный доклад	
Атомистическое компьютерное моделирование миграции Li^{+} в Y_2O_3 и структуре связанных оксидов	Вовк Р.В., Chroneos A., Busker G., Гулатис И.Л., Панченко С.В., Николенко А.Н., Петренко А.Г., Самойлов А.В.	Расширенный доклад	
База данных литературных источников по комплексообразованию ионов d-элементов	Бузько В.Ю., Ковалева И.А., Полушин А.А., Сухно И.В.		Тезисы
База данных литературных источников по комплексообразованию ионов s-элементов	Полушин А.А., Ковалева И.А., Бузько В.Ю., Сухно И.В.		Тезисы
База данных литературных источников по комплексообразованию ионов металлов в водно-органических и неводных средах	Ковалева И.А., Бузько В.Ю., Полушин А.А., Сухно И.В.		Тезисы
База данных литературных источников по термодинамическим свойствам растворов электролитов	Сухно И.В., Бузько В.Ю., Полушин А.А., Ковалева И.А.		Тезисы
База знаний по цитохрому р450	Пономаренко Е.А., Лисица А.В., Карузина И.И., Гусев С.А.		Тезисы
Барьеры инверсии цикла 4,4-диметил-1,3-диоксана	Шорников Д.В., Горбунова Н.В., Кантор Е.А.		Тезисы

ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ L-, D-ИЗОМЕРОВ АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ И ПРОЛИНА С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА
Демухаммедова С.Д., Алиева И.Н.

Бакинский государственный университет

Полуэмпирическими методами квантовой химии рассчитана электронная структура остатков пролина и L-, D-изомеров аспарагиновой кислоты. Изучено влияние абсолютной конфигурации замещающих групп при ассиметрическом атоме углерода на распределение электронной плотности и поверхность потенциальной энергии исследуемых молекул

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=414>

QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS OF THE PROLINE AND L-, D- ASPARAGINE AMINO ACIDS ELECTRONIC STRUCTURES

Demukhammedova S.D., Alieva I.N.

Baku State University

Electronic structures of the proline and L-, D-asparagine amino acids were investigated by the semi-empirical methods of quantum chemistry. The effect of the absolute configuration of the substituted groups at the asymmetrical carbon atom on the electronic density and potential energy surface of the investigated molecules was carried out

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=414

АКТИВНОСТЬ ЭКДИСТЕРОИДОВ В БИОТЕСТАХ, ИСКУССТВЕННЫХ (КОМПЬЮТЕРНЫХ) МОДЕЛЯХ И ЖИВЫХ СИСТЕМАХ

Тимофеев Н.П.

Научно-производственное предприятие КХ БИО

Проанализирована биологическая активность экдистероидов, исходя из базы данных структурного разнообразия и ключевых моментов взаимодействия с рецепторами. Показаны современные достижения в области прогнозирования активности программными средствами CoMFA и 4D-QSAR, приведены сравнительные результаты оптимизированных алгоритмов компьютерного моделирования. Рассмотрены направления исследований по молекулярному конструированию усовершенствованных конструкций рецепторов экдистероидов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=467>

ACTIVITY ECDYSTEROIDS IN BIOTESTS, ARTIFICIAL (COMPUTER) MODELS AND ALIVE SYSTEMS

Timofeev N.P.

CF "BIO", с. Koryazhma

A noncontinual model of van der Waals interactions is suggested for quantitative description of physical and chemical properties (enthalpy of evaporation, boiling point, interfacial tension, viscosity, etc.) of individual molecular liquids. The model based on molecular (molar) characteristics of liquids such as molecular refraction, electrical dipole moment and molar volume. Invariant character of the relationship between correlation ratio coefficients is established at electrostatic and dispersion contributions for all analyzed properties

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=467

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ $O^1(D)+H_2O - 2OH(X^2П)$ МЕТОДАМИ НЕЭМПИРИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Рябинкин И.Г., Новаковская Ю.В., Степанов Н.Ф.

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Методами неэмпирической молекулярной динамики в подходе Борна-Оппенгеймера рассмотрена реакция $O^1(D)+H_2O - 2OH(X^2П)$. Проанализировано относительное положение стационарных точек на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) системы. Обсужден выбор метода решения электронной задачи. На основе анализа реакционной траектории даны оценки времен жизни интермедиатов. Проанализировано распределение энергии по степеням свободы продуктов и отмечена его асимметрия

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=474>

NONEMPIRICAL DYNAMICS SIMULATIONS OF THE $O^1(D)+H_2O - 2OH(X^2П)$ REACTION

Ryabinkin I.G., Novakovskaya Yu.V., Stepanov N.F.

M.V.Lomonosov Moscow State University

The simulations of the $O^1(D)+H_2O - 2OH(X^2П)$. reaction using Born-Oppenheimer nonempirical molecular dynamics approach have been carried out. Relative energetic stability of different stationary points on the potential energy surface (PES) has been considered. Appropriate electronic structure method is found. Reaction trajectory analysis has been made and the lifetimes of the intermediates were estimated. It was found that products have an asymmetry in the excess energy distribution over rotational-vibrational degrees of freedom

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=474

АКТИВНОСТЬ ЭКДИСТЕРОИДОВ В БИОТЕСТАХ, ИСКУССТВЕННЫХ (КОМПЬЮТЕРНЫХ) МОДЕЛЯХ И ЖИВЫХ СИСТЕМАХ

Тимофеев Н.П.

Научно-производственное предприятие КХ БИО, г.Коряжма

Тимофеев Н.П.
КХ БИО

Экдистероиды представляют самое распространенное и многочисленное семейство стероидных соединений в биосфере; они участвуют в жизнедеятельности практически всех классов организмов, выполняя множественные функции. Ни одним из видов млекопитающих экдистероиды не синтезируются, в большинстве случаев они передаются от растений, где осуществляется их биосинтез, нижеследующим звеньям пищевой цепочки.

Физиологические эффекты экдистероидов на организм человека и теплокровных животных весьма разнообразны. Широкое распространение экдистероидов в природе закономерно приводит к вопросу относительно уровней и механизмов проявления ими биологической активности. Разработка теоретических основ молекулярных особенностей проявления активности экдистероидов – одно из главных направлений биомедицинской науки, которое в сочетании с современными методами биотестирования и компьютерного объемного моделирования пытается объяснить ключевые моменты взаимодействия экдистероида-лиганда и его рецептора в связке “структура-активность”, предсказать оптимальную конфигурацию и конформационное состояние идеального соединения – с целью осуществить искусственный химический синтез продуктов, способных к проявлению высокой биологической активности в живых системах.

В настоящее время распространенным экспресс-методом определения биологической активности является биотестирование с клетками насекомых, содержащих естественные экдистероидные рецепторы (ВІІ-биотест). Результаты биотестов более 300 индивидуальных соединений из зоо- и источников позволили создать единую базу данных структурного разнообразия экдистероидов, присутствующих в живых системах. Установлено, что экдистероиды существуют в виде С17-С30 молекул, среди которых наиболее распространены и высокоактивны С27-С29 структуры. Наибольшей активностью обладают индивидуальные экдистероиды эволюционно отдаленных групп: ponasterone A, muristerone, rapisterone D, а также производные kaladasterone и makisterone A, polypodyne B. Зооэкдистероиды, циркулирующие в гемолимфе насекомых, малоактивны, за исключением 20-hydroxyecdysone.

Близкие по химической структуре brassinosteroids, фитанолы, лимонены, кукурбитацины, а также алкалоиды, brassinosteroids, карденолиды, хромены, гликоалкалоиды, лигнаны, фенилпропаны и тритерпеноиды не действуют как агонисты или антагонисты экдистероидов в ВІІ биотесте. Продукты искусственного химического синтеза также неактивны, кроме как нескольких соединений из класса bisacylhydrazines, обладающих слабой активностью в биотестах.

Поиск оптимальной конфигурации и конформационного состояния модельных экдистероидов, на основе программного анализа физических их характеристик, представляет первое направление в области искусственного моделирования биологической активности и позволяет производить предсказания для новых продуктов искусственного синтеза (агонистов и антагонистов), полученных путем перестройки боковых радикалов лигандов. Наиболее значимые из них доступны для проверки в биотестах с естественными рецепторами. Поэтому компьютерные модели имеют значительный потенциал для отбора среди составов нового химического синтеза с фармакологической, инсектицидной или противопаразитарной активностью.

Первые программные методы CoMFA-анализа, базирующиеся на сведениях о кристаллическом строении лигандов, были довольно несовершенными, предсказывая сверхвысокую активность слабоактивным или инертным соединениям. Тем не менее они, при сочетании их с методами биотестирования, привели к важным выводам относительно взаимосвязи между соотношениями активности и пространственными характеристиками молекул экдистероидов.

Модели 4D-QSAR-анализа могут учитывать многократные конформационные изменения молекулы изучаемого лиганда во время взаимодействия его с

рецептором. Сравнение лучших 4D-QSAR моделей с поздними методами CoMFA-анализа показывает, что оба алгоритма имеют более высокие величины оправдываемости предсказаний по сравнению с ранними версиями. Результаты оптимизированных алгоритмов компьютерного моделирования во многих случаях близки к результатам биотестирования, расхождение в активности обычно не превышает 1-2 порядка. Однако нужно признать, что на сегодняшний день искусственные модели все еще несовершенные, чтобы учитывать все тонкости структурного разнообразия строения молекул экистероидов.

Второе направление в области компьютерного моделирования активности экистероидов развивается в области молекулярного усовершенствования конструкций рецепторов, которые бы показывали улучшенную деятельность по доступным для массового использования лигандам. Это поиск оптимальной пространственной ориентации (путем перебора аминокислотных остатков в активных центрах белковых молекул), обеспечение органо- и тканеспецифичности, синтез гибридных и мутантных рецепторов, введение дополнительных модулей активации (факторов экспрессии генов).

В реальных системах с клетками млекопитающих, в отличие от биотестов (опытов с искусственными пробирочными системами *in vitro*), возникают важные ограничения в проявлении активности экистероидов. Большинство химически очищенных от вторичных метаболитов экистероиды, за редким исключением, не проявляют активности; используемые дозы очень высоки, а максимальные уровни экспрессии незначительны.

Необходим ряд условий, чтобы активизировать их функции в организме. Проявление активности в живых системах зависит не столько от их присутствия в фармпрепаратах или пищевых добавках, сколько от взаимного сочетания с другими сопутствующими факторами, прохождения ими ряда последовательных стадий в качестве лигандов для внутриклеточных или мембранных рецепторов.

В случае с ядерными рецепторами на начальном этапе важным является взаимодействие со стрессовыми белками, образование гетеродимерного комплекса с рецепторами производных витамина А – 9-цис-ретиноевой кислоты (RXR-retinoids), участие в процессе ионов металлов-микроэлементов; а на заключительном – наличие мультибелковых комплексов, кофакторов транскрипции. Ключевую роль в способности стимулировать закрепление лиганда-экистероида и запускать транскрипцию играют белковые вещества – коактиваторы и корепрессоры, а также стрессовые факторы, вступающие в прямые белок-белковые взаимодействия с различными рецепторами.

При использовании неочищенных экстрактов экистероид содержащих растений в медицине можно ожидать суммирования негеномного и геномного эффекта действия фитоэкистероидов с другими веществами первичного и вторичного синтеза, что позволяет конструировать новые формы препаратов из цельного лекарственного сырья, характеризующихся высокой адаптогенной и фармакологической активностью при минимальных дозах (<http://leuzea.ru>).