

XXIV СИМПОЗИУМ «БИОИНФОРМАТИКА И КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ»

Памяти академика Николая Серафимовича Зефирова посвящается

Целью Симпозиума «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» является обсуждение наиболее важных достижений в разработке и практическом применении компьютерных методов поиска и валидации новых мишеней действия лекарств, конструирования *in silico* более эффективных и безопасных фармакологических веществ, оптимизации структуры и свойств лекарственных соединений, рациональных подходов к применению терапевтических средств в медицинской практике, и рассмотрение перспектив развития этой мультидисциплинарной области в будущем.

Симпозиум рассчитан на научных работников и специалистов, работающих в области создания, исследования и оценки лекарств нового поколения, разрабатываемых с применением методов био- и хемоинформатики на базе постгеномных технологий.

БИОИНФОРМАТИКА И КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ СЕССИЯ I

10 апреля 2018 года, 08:30 - 11:45

Центр международной торговли, Москва, Краснопресненская наб., 12, зал «Валдай»

Председатели: *Поройков Владимир Васильевич*
Ефремов Роман Гербертович

- | | |
|------------------|--|
| Палюлин В.А. | Компьютерное конструирование лекарств в работах академика Н.С. Зефирова |
| Alexandre Varnek | Chemography approach to chemical space analysis |
| Васильев П.М. | Оценка <i>in silico</i> спектра ионных токов азотсодержащих гетероциклических соединений |
| Филимонов Д.А. | Интегральная оценка токсичности ксенобиотиков с учетом их метаболизма в организме человека |
| Ефремов Р.Г. | Технология «молекулярного портрета» в решении задач распознавания и передачи сигналов биообъектами |
| Трибулович В.Г. | Влияние низкомолекулярных соединений на конформационную лабильность белка MDM2 |

**Для входа в ЦМТ необходимо зарегистрироваться на веб-сайте Конгресса (<http://chelovekilekarstvo.ru/conf2018/>) и распечатать пригласительный билет участника/слушателя.*

БИОИНФОРМАТИКА И КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ

11 апреля 2018 года, 10:00-19:30

(Проводится в Институте биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича по адресу: Погодинская ул., 10 стр. 8, 2-й этаж, конференц-зал. Проезд до ст. метро «Фрунзенская», «Спортивная», далее 20 минут пешком)

10:00 – 12:30 СЕССИЯ II

Председатели: *Васильев Павел Михайлович*
Веселовский Александр Владимирович

- Беленикин М.С. Метаботропные глутаматные рецепторы: терапевтический потенциал
- Яковлев П.А. Современные методы разработки белковых лекарственных средств
- Сулимов В.Б. Программа SOL-P: новое поколение программ докинга
- Григорьев В.Ю. Эффекты памяти в пространственных рядах модельных пептидов
- Борисевич С.С. Использование современных методов молекулярного моделирования для определения биологической мишени действия нового противовирусного агента камфецина
- Тарасова О.А. Компьютерная оценка резистентности ВИЧ к ингибиторам обратной транскриптазы и протеазы на основе анализа аминокислотных последовательностей и химических структур антиретровирусных препаратов
- Беллонин К.В. Методика автоматического построения дескрипторов формы молекулярных поверхностей в задаче прогнозирования биологических свойств химических соединений

Перерыв

14:00 – 16:00 СЕССИЯ III (КОНКУРС МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ)

Председатели: *Сулимов Владимир Борисович*
Лагунин Алексей Александрович

- Австрикова М.В. Исследование механизма возникновения парадоксального сигнального пути V-Raf киназы методом молекулярной динамики
- Беришвили В.П. Оценка активности потенциальных лигандов с помощью методов машинного обучения на основе анализа траекторий молекулярной динамики
- Владимиров С.А. Влияние точечных мутаций на динамическое поведение белков E оболочки вирионов вирусов клещевого энцефалита и Повассан
- Залевский А.О. COSM - инструмент для крупнозернистого моделирования ДНК-оригами
- Замалетдинов М.Ф. Моделирование димерных состояний трансмембранных доменов тирозинкиназ семейства рецептора инсулина
- Зефирова Н.А. Молекулярный дизайн, синтез и биотестирование структурно необычных лигандов тубулина
- Иванов А.В. Поиск соединений с хелатирующей активностью методом квантово-химического нейросетевого QSAR моделирования

- Ильин И.С. Разработка новых антикоагулянтов с использованием методов молекулярного моделирования ингибиторов белков системы свертывания крови
- Колчина Н.В. Конструирование коротких пептидов для связывания с двунитовой ДНК в классической В-форме
- Крупышева А.Н. Исследование механизмов взаимодействия CIS и JAK белков в НК клетках методом молекулярной динамики
- Майоров И.С. Компьютерная оценка взаимосвязи "структура-свойство" в поиске детерминант эволюции и резистентности вируса иммунодефицита человека
- Муртазалиева Х.А. Компьютерный поиск и экспериментальная валидация фармакологических веществ, действующих на клеточные линии MDA-MB231 и MCF7

Перерыв

16:30 – 18:45 СЕССИЯ IV (КОНКУРС МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ)

Председатели: *Палюлин Владимир Александрович*
Филимонов Дмитрий Алексеевич

- Муругова А.А. Направленный поиск *in silico* и *in vitro* ингибиторов DPP-4 среди производных конденсированных азолов
- Орлов А.А. Картирование химического пространства ингибиторов репродукции флавивирусов - низкомолекулярных органических соединений и компонентов гуминовых систем на основе базы данных ViralChEMBL и экспериментальных данных
- Панина И.С. Изучение методом молекулярной динамики механизма межмолекулярного распознавания лантибиотиком низин его мишени в биомембране
- Пац К.М. Использование алгоритмов машинного обучения для генерации химических структур, аффинных к заданной белковой мишени
- Рубина С.С. Математическая модель развития множественной миеломы
- Семина М.И. Компьютерная оценка межлекарственных взаимодействий, приводящих к гепатотоксичности
- Соколова Е.В. Поиск *in silico* и *in vitro* бифункциональных азотсодержащих гетероциклических соединений с сочетанной антигликирующей и активирующей AMPK активностью
- Степанов А.А. Трансляционная модель таупатии *in silico*
- Столбов Л.А. Анализ взаимосвязей структура-активность на основе информации по ингибированию протеазы ВИЧ-1, доступной в ChEMBL
- Терехов Р.П. Исследование циклооксигеназы-2 как биологической мишени для дигидрокверцетина
- Яналиева Л.Р. Мультитаргетные ингибиторы RAGE, p38 и NF- κ B – соединения, предотвращающие AGE-индуцированные патии при сахарном

диабете и болезни Альцгеймера

19:00 – 19:30 Подведение итогов Симпозиума