

Научная программа

Понедельник, 5 апреля

Председатели: Поройков Владимир Васильевич, Ефремов Роман Гербертович

Пленарные доклады

09:30	10:00	Открытие Симпозиума	
10:00	10:30	Егоров Алексей Михайлович	АЛЛОСТЕРИЧЕСКИЕ ИНГИБИТОРЫ БЕТА-ЛАКТАМАЗ ДЛЯ ПРЕОДОЛЕНИЯ РЕЗИСТЕНТНОСТИ БАКТЕРИЙ К АНТИБИОТИКАМ
10:30	11:00	Немухин Александр Владимирович	КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ КОМПОНЕНТОВ ВИРУСА SARS-COV-2

Устные доклады

11:00	11:20	Хренова Мария Григорьевна	МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ГИДРОЛИЗА АНТИБИОТИКОВ МЕТАЛЛО-В-ЛАКТАМАЗАМИ И ИНГИБИРОВАНИЕ ЭТИХ ФЕРМЕНТОВ
11:20	11:40	Бибилашвили Роберт Шалвович	МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕПТИДНЫХ ИНГИБИТОРОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РЕЦЕПТОР-СВЯЗЫВАЮЩЕГО ДОМЕНА ВИРУСА SARS-CoV-2 С КЛЕТОЧНЫМ РЕЦЕПТОРОМ ACE-2
11:40	12:00	Vladimir Sulimov	START OF ANTI-COVID-19 DRUG DESIGN USING INHIBITORS OF THE SARS-COV-2 MAIN PROTEASE
12:00	12:20	Поляков Игорь Вадимович	РАЗРАБОТКА И ТЕСТИРОВАНИЕ КМ/ММ ИНТЕРФЕЙСА NAMD/TERACHEM ДЛЯ РАСЧЕТОВ ПРОФИЛЕЙ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ РЕАКЦИЙ
12:20	12:40	Маджидов Тимур Исмаилович	МНОГОВАРИАНТНОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО»
12:40	13:00	Кулакова Анна Михайловна	МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ИНГИБИРОВАНИЯ ФЕРМЕНТА KRAS С ОНКОГЕННОЙ МУТАЦИЕЙ G12C СОЕДИНЕНИЕМ ARS-853

Председатели: Филимонов Дмитрий Алексеевич, Маджидов Тимур Исмаилович

Пленарные доклады

13:00	13:30	Alexander Kel	GENOME ENHANCER: NON-CODING GENOME GIVES CLUES TO ANTICANCER DRUG TREATMENT
13:30	14:00	Alexandre Varnek	CHEMOGRAPHY APPROACH TO CHEMICAL SPACE EXPLORATION

Устные доклады

14:00	14:20	Орлов Алексей Александрович	CHEMOGRAPHY OF ANTIVIRAL STRUCTURE-ACTIVITY INFORMATION
14:20	14:40	Анашкина Анастасия Андреевна	MODELLING OF NEF INTERACTION WITH CALNEXIN AND ABCA1 REVEALED POTENTIAL INHIBITOR COMPOUNDS
14:40	15:00	Нилов Дмитрий Константинович	VSFILT – НОВЫЙ ИНСТРУМЕНТ СТРУКТУРНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ДЛЯ ВИРТУАЛЬНОГО СКРИНИНГА
15:00	15:20	Григорьева Татьяна Алексеевна	ПОТЕНЦИАЛ НУКЛЕОТИД-СВЯЗЫВАЮЩЕГО ДОМЕНА В РАЗРАБОТКЕ ИНГИБИТОРОВ АВС ЭКСПОРТЕРОВ
15:20	15:40	Радченко Евгений Валерьевич	МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ДИЗАЙН МОНО- И БИСХРОМОФОРНЫХ КАРБОЦИАНИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ
15:40	16:00	Andrey Buglak	APPLICATION OF QSPR METHODOLOGY TO THE ANALYSIS OF PHOTSENSITIZERS PHOTODYNAMIC ACTIVITY

Вторник, 6 апреля

Председатели: Веселовский Александр Владимирович, Палюлин Владимир Александрович

Пленарные доклады

10:00	10:30	Габибов Александр Габирович	ДИЗАЙН СПЕЦИФИЧЕСКИХ АНТИТЕЛ НА ОСНОВЕ QM/MM ПОДХОДА
10:30	11:00	Ильина Елена Николаевна	МИКРОБИОМ КИШЕЧНИКА И МЕТАБОЛИЗМ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Конкурс молодых ученых

11:00	11:15	Арзуманян Виктория Арменовна	ОЦЕНКА ГЕТЕРОГЕННОСТИ ТРАНСКРИПТОМОВ ОПУХОЛЕВОЙ КЛЕТОЧНОЙ ЛИНИИ HEPG2
11:15	11:30	Бизюкова Надежда Юрьевна	ИДЕНТИФИКАЦИЯ ГЕНОВ, ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗНАЧИМЫХ ДЛЯ ПРОГРЕССИИ ВИЧ-ИНФЕКЦИИ, НА ОСНОВЕ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО АНАЛИЗА ТЕКСТОВ
11:30	11:45	Хадеева Лилия Равиловна	ВЛИЯНИЕ ОСТАКА ASN676 НА СВОЙСТВА ПОРЫ ИОННОГО КАНАЛА TRPV1
11:45	12:00	Голубева Арина Владимировна	ПОИСК IN SILICO ИНГИБИТОРОВ LPS-ИНТОКСИКАЦИИ С ПРЯМОЙ F2A-АНТИКОАГУЛЯНТНОЙ АКТИВНОСТЬЮ
12:00	12:15	Задорожный Антон Дмитриевич	КОМПЬЮТЕРНАЯ ОЦЕНКА ПАТОГЕННОСТИ ЗАМЕН АМИНОКИСЛОТНЫХ ОСТАТКОВ НА ОСНОВЕ MNA ДЕСКРИПТОРОВ ПЕПТИДОВ ОТДЕЛЬНЫХ БЕЛКОВ И БАЙЕСОВСКОГО ПОДХОДА
12:15	12:30	Ионов Никита Сергеевич	ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ОЦЕНОК IN SILICO ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ РАЗРАБОТКИ СОСТАВА ФАРМКОМПОЗИЦИИ, ЦИТОТОКСИЧНОЙ В ОТНОШЕНИИ ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК
12:30	12:45	Камарян Виктор Самвелович	IN SILICO СКРИНИНГ И ДОКИНГ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ АКТИВАТОРОВ TRPC6 НА ОСНОВЕ ФАРМАКОФОРА N-N- ДИЗАМЕЩЕННЫХ ПИПЕРАЗИНОВ
12:45	13:00	Kniga Artem	MOLECULAR MODELING OF TCR-PMHC COMPLEXES
13:00	13:15	Королева Анастасия Руслановна	ОЦЕНКА IN SILICO ВКЛАДА КИНАЗ-ИНГИБИРУЮЩЕЙ АКТИВНОСТИ В СНИЖЕНИИ LPS-ИНТОКСИКАЦИИ

13:15	13:30	Короткевич Евгения Игоревна	ВЕБ-ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ ПРОГНОЗА МЕТАБОЛИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ ЛЕКАРСТВЕННО-ПОДОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ
<i>Председатели: Васильев Павел Михайлович, Трибулович Вячеслав Генрихович</i>			
Пленарные доклады			
13:30	14:00	Филимонов Дмитрий Алексеевич	ПРОГНОЗ СПЕКТРОВ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ И ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ
14:00	14:30	Igor Tetko	RECENT ADVANCES IN MACHINE LEARNING FOR ADMETOX PREDICTION
Конкурс молодых ученых			
14:30	14:45	Кривицкая Александра Вячеславовна	БОРОНОВЫЕ КИСЛОТЫ КАК ИНИБИТОРУЮЩИЕ АГЕНТЫ МЕТАЛЛО- β -ЛАКТАМАЗЫ NDM-1
14:45	15:00	Макичян Ани Тиграновна	IN SILICO SCREENING AND MOLECULAR DOCKING STUDY OF CHOLINESTERASE INHIBITORS BASED ON PHARMACOPHORE OF CHROMOPHORE OF GREEN FLUORESCENT PROTEIN
15:00	15:15	Matveieva Mariia	BENCHMARKS FOR INTERPRETATION OF QSAR MODELS
15:15	15:30	Перфильев Максим	КОРРЕЛЯЦИОННАЯ СЕТЬ ИНГИБИТОРОВ КИНАЗ, РЕГУЛИРУЮЩИХ СНИЖЕНИЕ LPS- ИНТОКСИКАЦИИ
15:30	15:45	Савосина Полина Игоревна	ВЕБ-СЕРВИС ДЛЯ ОЦЕНКИ СХОДСТВА ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ И ИЗВЕСТНЫХ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СУБСТАНЦИЙ
15:45	16:00	Семенова Екатерина Владимировна	О ВОЗМОЖНЫХ ВЗАИМОСВЯЗЯХ АКТИВНОСТИ ХИРАЛЬНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ И ХИРАЛЬНЫХ СТРУКТУР БИОМАКРОМОЛЕКУЛ- МИШЕНЕЙ
16:00	16:15	Тальдаев Амир Халилевич	СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛАНТИБИОТИКОВ НИЗИНОВОГО ТИПА В ВОДЕ: ИССЛЕДОВАНИЕ IN SILICO
16:15	16:30	Фатыхова Аделия	ПЛАТФОРМА ДЛЯ ДИЗАЙНА СИНТЕЗА МОЛЕКУЛ С ЗАДАНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ
16:30	16:45	Фомина Анастасия Дмитриевна	ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ ИНГИБИТОРОВ ПРОТЕАЗЫ 3CLPRO КОРОНАВИРУСА SARS-COV-2 НА ОСНОВЕ АНСАМБЛЕВОГО ДОКИНГА
16:45	17:00	Фроленко Василиса Сергеевна	ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ ИНГИБИТОРОВ МЕТИЛТРАНСФЕРАЗЫ ВИРУСА КЛЕЩЕВОГО

			ЭНЦЕФАЛИТА НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
17:00	17:15	Васильева Варвара Олеговна	ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕСКРИПТОРЫ В ЗАДАЧЕ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НА ОБОБЩЕННЫХ ДЕРЕВЬЯХ РЕШЕНИЙ
17:15	17:30	Костюк Клим Алексеевич	ВЛИЯНИЕ ХОЛЕСТЕРИНА НА «МОЗАИЧНОСТЬ» ПОВЕРХНОСТИ ЛИПИДНОГО БИСЛОЯ

Среда, 7 апреля

Председатели: Осолодкин Дмитрий Иванович, Pavel Polishchuk

Пленарные доклады

14:00	14:30	Jerome Golebiowski	DRAW ME AN ODOR! PROTEOCHEMOMETRICS OF OLFACTION
14:30	15:00	Палюлин Владимир Александрович	ДИЗАЙН НОВЫХ МОДУЛЯТОРОВ ИОНОТРОПНЫХ ГЛУТАМАТНЫХ РЕЦЕПТОРОВ

Устные доклады

15:00	15:20	Васильев Павел Михайлович	СЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМНОЙ МУЛЬТИТАРГЕТНОЙ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ
15:20	15:40	Зефиоров Николай Алексеевич	КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПРОГНОЗ И РЕЗУЛЬТАТЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИМИТОТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ И ВЛИЯНИЯ НА СЕТЬ МИКРОТРУБОЧЕК ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК НОВЫХ СЛОЖНЫХ ЭФИРОВ ПОДОФИЛЛОТОКСИНА
15:40	16:00	Галзитская Оксана Валериановна	АМИЛОИДОГЕННЫЕ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПЕПТИДОВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ НА ОСНОВЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ РИБОСОМНОГО БЕЛКА S1
16:00	16:20	Махаева Галина Файвелевна	ДИЗАЙН МУЛЬТИТАРГЕТНЫХ ПРЕПАРАТОВ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ БОЛЕЗНИ АЛЬЦГЕЙМЕРА НА ОСНОВЕ ИНГИБИТОРОВ ХОЛИНЭСТЕРАЗ
16:20	16:40	Maria Sorokina	CHASING NATURAL PRODUCTS: THE COLLECTION OF OPEN NATURAL PRODUCTS (COCONUT)
16:40	17:00	Литвинов Роман Александрович	КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКАЯ НЕЙРОСЕТЕВАЯ QSAR-МОДЕЛЬ ПРОГНОЗА АНТИГЛИКИРУЮЩЕЙ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ АЗОЛОТРИАЗИНА

Председатели: Лагунин Алексей Александрович, Поройков Владимир Васильевич

Устные доклады

17:00	17:20	Ipsa Singh	DEVELOPMENT OF NOVEL ANTICANCER DRUGS USING IN SILICO STUDIES ON AURORA KINASE B USING PUBCHEM DATABASE
-------	-------	------------	---

17:20	17:40	Тиньков Олег Викторович	QSAR АНАЛИЗ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА ПРОИЗВОДНЫХ ГИДРОКСАМОВЫХ КИСЛОТ В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРОВ HDAC
17:40	18:00	Бессонова Татьяна Александровна	ПОИСК НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ЛИГАНДОВ, ИНГИБИРУЮЩИХ ФОРМИРОВАНИЕ БИОПЛЕНОК E. COLI
18:00	18:20	Иванов Сергей Михайлович	ПРЕДСКАЗАНИЕ ВЫРАЖЕННОЙ ГЕПАТОТОКСИЧНОСТИ ПРИ ПОМОЩИ АНАЛИЗА СВЯЗЕЙ «СТРУКТУРА-АКТИВНОСТЬ» С УЧЕТОМ ДОЗЫ И СПОСОБА ПРИМЕНЕНИЯ ЛЕКАРСТВ
18:20	18:40	Юрий Львович Орлов	РЕКОНСТРУКЦИЯ ГЕННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПОИСКА ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ НА ПРИМЕРЕ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА
18:40	19:00	Унанян Лерник	<i>IN SILICO</i> ПРЕДСКАЗАНИЯ БИОАКТИВНОСТИ НЕКОТОРЫХ ИЗОНИАЗИДОВ
Пленарные доклады			
19:00	19:30	Alexander Tropsha	BIOMEDICAL KNOWLEDGE GRAPHS: DEVELOPMENT AND APPLICATION TO DRUG DISCOVERY AND REPURPOSING
19:30	20:00	Gennady Verkhivker	COMPUTATIONAL STRUCTURAL BIOLOGY AND BIOINFORMATICS STUDIES OF THE SARS-COV-2 SPIKE PROTEINS: PROBING MOLECULAR MECHANISMS OF INFECTIVITY AND ANTIBODY-INDUCED NEUTRALIZATION THROUGH ALLOSTERIC DRUG DISCOVERY
20:00	20:30	Подведение итогов Симпозиума	

