

**СЕКЦИЯ № 4: ФАРМАКОИНФОРМАТИКА: ПОИСК И МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ**

*Председатель: А.Г. Мажуга*

**ЗАСЕДАНИЕ 1**

*Модераторы: А.Г. Мажуга, В.А. Палюлин*

**ИФМиБ, Зал № 4**

**1 ноября, 14:30 – 16:30**

- 30 мин** С.Н. Кочетков *Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва, Россия*  
**Drug design в постгеномную эпоху: традиции и инновации**
- 30 мин** И.С. Антипин<sup>1,2</sup>, В.А. Бурилов<sup>1</sup>, С.Е. Соловьева<sup>1,2</sup> *<sup>1</sup>Казанский федеральный университет; <sup>2</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия*  
**Каликс[4]арены для биомедицинских применений**
- 15 мин** А.Г. Мажуга<sup>1,2,3</sup>, А.Э. Мачулкин<sup>1</sup>, Е.К. Белоглазкина<sup>1</sup> *<sup>1</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет; <sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева; <sup>3</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия*  
**Достижения лаборатории "тканеспецифических лигандов" в области адресной доставки терапевтических агентов**
- 15 мин** А.Л. Захаренко, О.И. Лаврик *Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск, Россия*  
**Ферменты репарации ДНК -важнейшие мишени для создания антираковых препаратов**
- 15 мин** Н.Л. Миронова, О.А. Патутина, Е.В. Бреннер, А.М. Курильчиков, М.А. Зенкова, В.В. Власов *Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск, Россия*  
**Нуклеазы как потенциальные средства терапии опухолевых заболеваний**
- 15 мин** Н.П. Шарова, Т.М. Астахова, А.В. Морозов, П.А. Ерохов, М.И. Михайловская, Н.И. Чупикова, Р.Р. Сафаров *Институт биологии развития им. Н.К. Кольцова РАН; \*Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва, Россия*  
**Поиск и тестирование *in vitro*, *in cellulo* и *in vivo* новых бортезомиб-содержащих противоопухолевых композиций**

**СЕКЦИЯ № 4: ФАРМАКОИНФОРМАТИКА: ПОИСК И МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ**

*Председатель: А.Г. Мажуга*

**ЗАСЕДАНИЕ 2**

*Модераторы: С.Н. Кочетков, А.Г. Мажуга*

**ИФМиБ, Зал № 4**

**1 ноября, 17:00 – 19:00**

**30 мин** В. Лазарев, Е. Михайлова, И. Гужова, Б. Маргулис *Институт цитологии РАН, Санкт-Петербург, Россия*

**Белки, формирующие агрегаты под действием окислительного стресса, как мишени для терапии нейродегенерации**

**30 мин** В.А. Палюлин, М.И. Лавров, Д.С. Карлов, Е.В. Радченко *Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

**Компьютерный дизайн нейропротекторных веществ**

**15 мин** S. Erokhina<sup>1</sup>, Y. Chushkin<sup>2</sup>, L. Pastorino<sup>3</sup>, D. Di Lisa<sup>3</sup>, A.G. Kiiamov<sup>1</sup>, A.R. Faizullina<sup>1</sup>, D.A. Tayurskii<sup>1</sup>, S. Iannotta<sup>4</sup>, V. Erokhin<sup>1,4</sup> *<sup>1</sup>Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский федеральный университет, Казань, Россия; <sup>2</sup>Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция; <sup>3</sup>Департамент информатики, биоинженерии, роботики и системной инженерии, Генуэзский университет, Генуя, Италия; <sup>4</sup>Институт материалов материалов для электроники и магнетизма, Национальный совет по науке, Парма, Италия*

**Функциональные полимерные контейнеры для лекарственных препаратов: Рентгеновская микроскопия с использованием когерентного синхротронного излучения**

**15 мин** Е.К. Бессолицына, Е.А. Ермакова, Я.Ю. Топоркова *Казанский институт биохимии и биофизики – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия*

**Рациональный дизайн структуры мини-фермента цитохрома P450 как способ предсказания ингибиторов ферментативного действия**

**15 мин** В.А. Золотцев, В.А. Костин, А.С. Латышева, Р.А. Новиков, Я.В. Ткачев, А.Ю. Мишарин *Научно-исследовательский институт биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича, Москва; Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва, Россия*

**Возможности традиционного синтеза в конструировании стероидных противораковых агентов**

**АНОНСЫ СТЕНДОВЫХ ВЫСТУПЛЕНИЙ – ПО 3 МИН**

**СЕКЦИЯ № 4: ФАРМАКОИНФОРМАТИКА: ПОИСК И МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ**

*Председатель: А.Г. Мажуга*

**ЗАСЕДАНИЕ 3**

*Модераторы: И.С. Антипин, А.М. Егоров*

**ИФМиБ, Зал № 4**

**2 ноября, 9:00 – 11:00**

**30 мин Р.Г. Ефремов** *Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, НИУ Высшая школа экономики, Москва, Россия*

**Технология «молекулярного портрета» в анализе биомолекулярных взаимодействий**

**30 мин Г.Е. Позмогова, Ю.Г. Кириллова, Т.А. Волков, В.В. Северов, А.М. Варижук** *ФНКЦ физико-химической медицины ФМБА России, Москва, Россия*

**G4-сайты полинуклеотидов как объекты и субъекты при создании новых адресованных лекарств**

**15 мин В.И. Кузьмичева, Н.А. Колотьева, Ф.Н. Гильмиярова** *Самарский государственный медицинский университет, Самара, Россия*

**Структурно-функциональный потенциал лактата: влияние на антиген-антительное взаимодействие**

**15 мин Т.И. Маджидов<sup>1</sup>, Р.И. Нугманов<sup>1</sup>, Т.Р. Гимадиев<sup>1</sup>, В.А. Афонина<sup>1</sup>, А.А. Фатыхова<sup>1</sup>, Р.Н. Мухаметгалеев<sup>1</sup>, А.Б. Рахимбекова<sup>1</sup>, С.И. Мусаева<sup>1</sup>, Ф. Боначера<sup>2</sup>, И.И. Баскин<sup>3</sup>, И.С. Антипин<sup>1</sup>, А.А. Варнек<sup>2</sup>** *<sup>1</sup>НИЛ «Хемоинформатика и молекулярное моделирование», Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский федеральный университет, Казань, Россия; <sup>2</sup>Лаборатория хемоинформатики, Страсбургский университет, Страсбург, Франция; <sup>3</sup>Химический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

**Хемоинформатика в анализе и предсказании характеристик химических реакций**

**15 мин С.Н. Пчелина<sup>1,2</sup>, М.А. Николаев<sup>1,2</sup>, Г.Н. Рычков<sup>2</sup>, А.К. Сенкевич<sup>1,2</sup>, Г.В. Байдакова<sup>3</sup>, Е.Ю. Захарова<sup>3</sup>, А.К. Емельянов<sup>1,2</sup>** *<sup>1</sup>Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет им. И.П. Павлова, Санкт-Петербург; <sup>2</sup>Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина; <sup>3</sup>Медико-генетический научный центр, Москва, Россия*

**Макрофаги периферической крови человека как модель заболеваний ассоциированных с дисфункцией глюкоцереброзидаз. Подходы к терапии болезни Паркинсона и болезни Гоше**

**15 мин Е.А. Соколова<sup>1,2</sup>, Г.М. Прошкина<sup>2</sup>, О.М. Кутова<sup>1</sup>, О.Н. Шилова<sup>2</sup>, А.А. Шульга<sup>2</sup>, С.М. Деев<sup>1,2</sup>, И.В. Балалаева<sup>1</sup>** *<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород; <sup>2</sup>Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва, Россия*

**Рекомбинантный бифункциональный токсин на основе HER2-специфичного модуля класса дарпинов для таргетной противоопухолевой терапии**