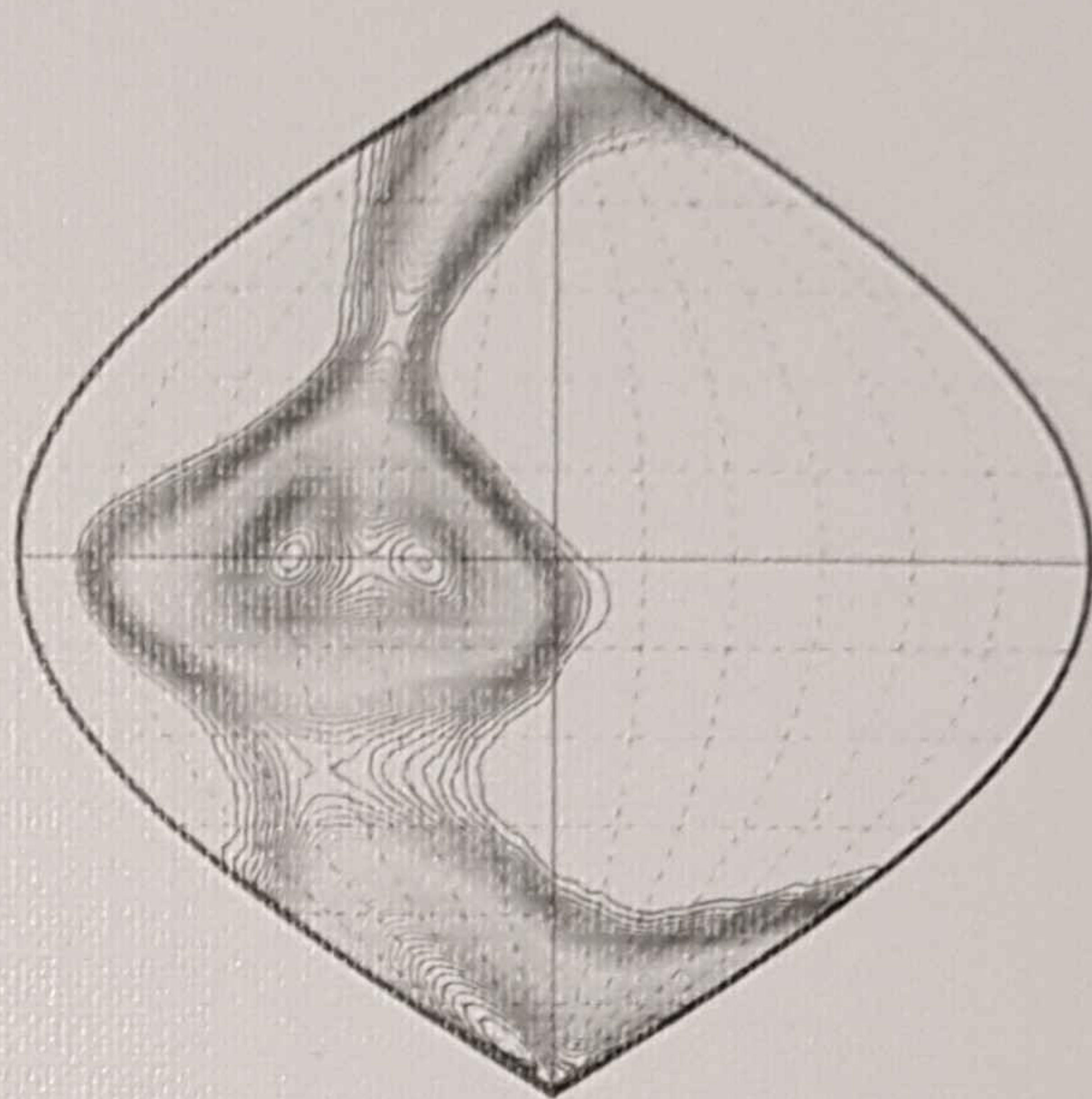
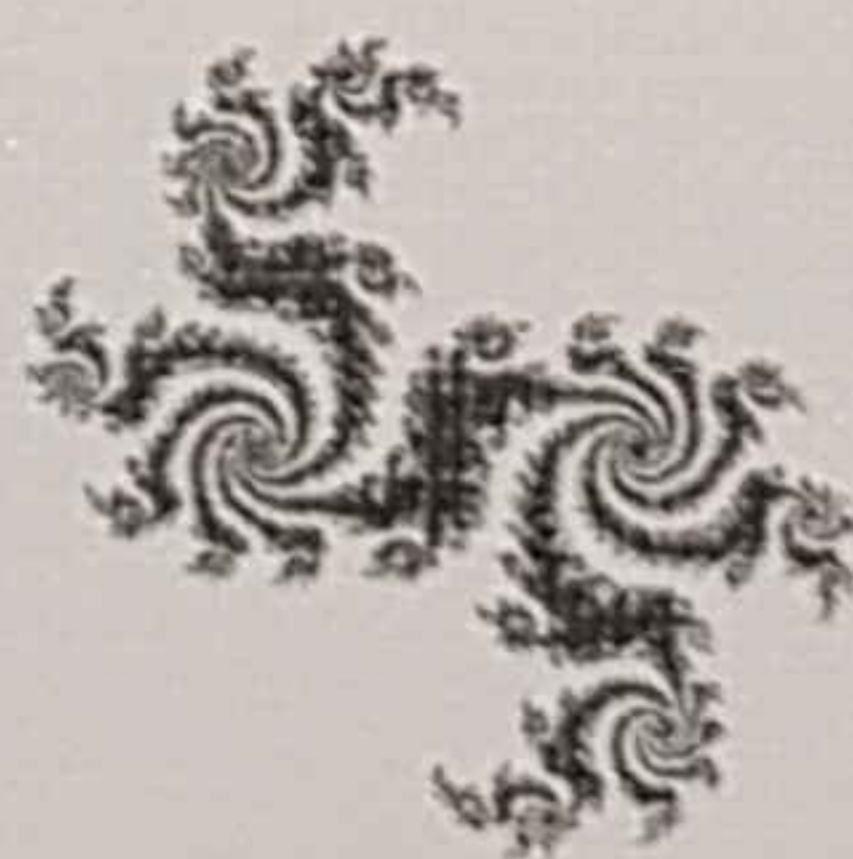


МАТЕМАТИКА КОМПЬЮТЕР ОБРАЗОВАНИЕ



Биофизика сложных систем
Вычислительная и системная биология
Молекулярное моделирование



Тезисы

Дубна, 27 января – 1 февраля 2020

Двадцать седьмая международная конференция

**МАТЕМАТИКА
КОМПЬЮТЕР
ОБРАЗОВАНИЕ**

Симпозиум с международным участием

Биофизика сложных систем

Вычислительная и системная биология

Молекулярное моделирование

Под редакцией

Г.Ю. Ризниченко и А.Б. Рубина

Тезисы

Выпуск 27



Москва ♦ Ижевск

2020

ДВАДЦАТЬ СЕДЬМАЯ МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
МАТЕМАТИКА ◊ КОМПЬЮТЕР ◊ ОБРАЗОВАНИЕ
Дубна, 27 января – 1 февраля 2020 г.

XI ОБЩЕРОССИЙСКИЙ СИМПОЗИУМ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ
БИОФИЗИКА СЛОЖНЫХ СИСТЕМ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ И СИСТЕМНАЯ БИОЛОГИЯ, МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Организаторы Конференции:

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Государственный университет "Дубна", Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ г. Дубна), Пулковский центр биологических исследований РАН, Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Национальный комитет российских биофизиков РАН, Межрегиональная общественная организация «Женщины в науке и образовании».

Международный Научный Комитет:

Н.В. Аммосова, Н.В. Белотелов, Е.В. Борисова, А.Р. Браже, А.Е. Варшавский, Н.А. Винокурова, Г.Т. Гурия, И.Г. Есипова, Р.Г. Ефремов, Г.Р. Иваницкий, В.И. Залыгин, В.Е. Карпов, И.Б. Коваленко, А.В. Коганов, В.М. Комаров, В.В. Кореньков, В.Д. Лахно, А.И. Лобанов, Е.И. Маевский, Г.Г. Малинецкий, В.А. Матвеев, Н.А. Митин, А.М. Нестеренко, Ю.Н. Орлов, Т.Ю. Плюснина, А.А. Полежаев, О.Е. Пыркина, Ж.М. Раббот, Г.Ю. Ризниченко, Н.Х. Розов, Ю.М. Романовский, А.Б. Рубин, М.Ю. Сидорова, Ю.Л. Словохотов, А.А. Сорокин, П.Н. Сорокин, Е.А. Солодова, Т.А. Стриж, Ю.Ю. Тарасевич, А.Ю. Трифонов, В.Г. Туманян, Т.В. Тюпикова, Л.А. Уварова, М.Н. Уетинин, Е.Я. Фрисман, Д.В. Фурсаев, М.Г. Хренова, Е.Н. Черемисина, А.И. Чуличков, А.К. Шайтан, А.В. Шаповалов, А.В. Шатров, Г.Н. Яковенко, Л.В. Якушевич (Россия), W. Ebeling, R. Pose (Германия), В.А. Шлык (Беларусь), С.В. Беспалова, Н.Д. Гернет, С.В. Чернышенко (Украина).

Оргкомитет:

Галина Юрьевна Ризниченко – Председатель Оргкомитета МКО-26, профессор Московского государственного университета, председатель правления Межрегиональной общественной организации «Женщины в науке и образовании» (г. Москва);
Андрей Борисович Рубин – Председатель Оргкомитета Симпозиума «Биофизика сложных систем: вычислительная биология и молекулярное моделирование», член-корр. РАН, профессор, зав. кафедрой биофизики биологического факультета Московского государственного университета (г. Москва);
Евгения Наумовна Черемисина – сопредседатель, директор Института системного анализа и управления Государственного университета «Дубна» (г. Дубна);
Дмитрий Владимирович Фурсаев – сопредседатель, ректор Государственного университета «Дубна» (г. Дубна);
Владимир Васильевич Кореньков – сопредседатель, директор Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна);
Рудольф Гейнцевич Поле – советник дирекции Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна);
Ответственный секретарь – Полина Викторовна Фурсова, Сергей Сергеевич Хрущёв;
А.М. Абатурова, Т.П. Гончарова, А.Н. Дьяконова, Д.В. Зленко, Е.Ю. Кирпичева, Е.В. Кочеткова, Л.Н. Краснопольская, И.Б. Коваленко, А.М. Нестеренко, Ю.Д. Нечипуренко, Т.Ю. Плюснина, С.В. Потемкина, В.А. Сочинко, В.А. Федоров.

Адрес Оргкомитета: 119234, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр. 12, МГУ, Биологический ф-т, кафедра биофизики, тел.: (495) 939-02-89, факс: (495) 939-11-15,
E-mail: mce@mce.su, сайт: www.mce.su.

Секции

- S1. Математические теории
- S2. Вычислительные методы и математическое моделирование
- S3. Анализ сложных биологических систем. Эксперимент и модели
- S4. Социально-экономические исследования
- S5. Гуманитарное и естественно-научное образование
- S6. Музей в современном мире

ISBN 978-5-4344-0861-5

© Межрегиональная общественная организация «Женщины в Науке и Образовании», 2020

W2

МОЛЕКУЛЯРНОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ

МOLECULAR
MODELING

Руководители:

*Илья Борисович Коваленко, Владислав Михайлович Комаров,
Галина Юрьевна Ризниченко, Андрей Борисович Рубин,
Мария Григорьевна Хренова, Алексей Константинович Шайтан.*

АНАТОМИЯ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ N...H В КОМПЛЕКСАХ МЕТАНОЛ-ИМИДАЗОЛ: ВЛИЯНИЕ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ И РАСТВОРЕ

Кривицкая А.В.^{1,2}, Хренова М.Г.^{2,3}, Цирельсон В.Г.^{1,2}

¹РХТУ имени Д.И. Менделеева, Москва, Миусская пл., 9

²ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Ленинский проспект, 33, стр. 2

³МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Ленинские Горы, 1

В настоящее время остро стоит вопрос нахождения физически обоснованных дескрипторов внутри- и межмолекулярных взаимодействий. В данной работе представлены результаты реализации одного из этапов этой программы, а именно, исследования пятнадцати модельных систем, представляющих собой комплексы метанол-имидазол с заместителями в газовой фазе и растворе. Мы сфокусировались на исследовании влияния заместителей на свойства водородных связей N...H, формирующих эти комплексы.

Расчет равновесных геометрий исследуемых систем в газовой фазе был произведен методом DFT/PBE0/6-31G**, а в растворе - комбинированным методом квантовой механики/молекулярной механики, где квантовая часть описывалась методом DFT/PBE0/6-31G**, а молекулы воды молекулярно-механической части - силовым полем TIP3P. Затем для всех КМ-подсистем проводился квантово-топологический анализ: определялись характеристики электронной плотности в критических точках связей N...H и энергии водородных связей. Также особенности водородной связи были определены с помощью электростатического потенциала и потенциала, действующего на один электрон в молекуле (РАЕМ) с учетом вклада обменной корреляции. Для визуализации РАЕМ был нанесен на замкнутые изоповерхности электронной плотности $\rho = 0,055$, пронизываемые N...H-связями (рис.1).

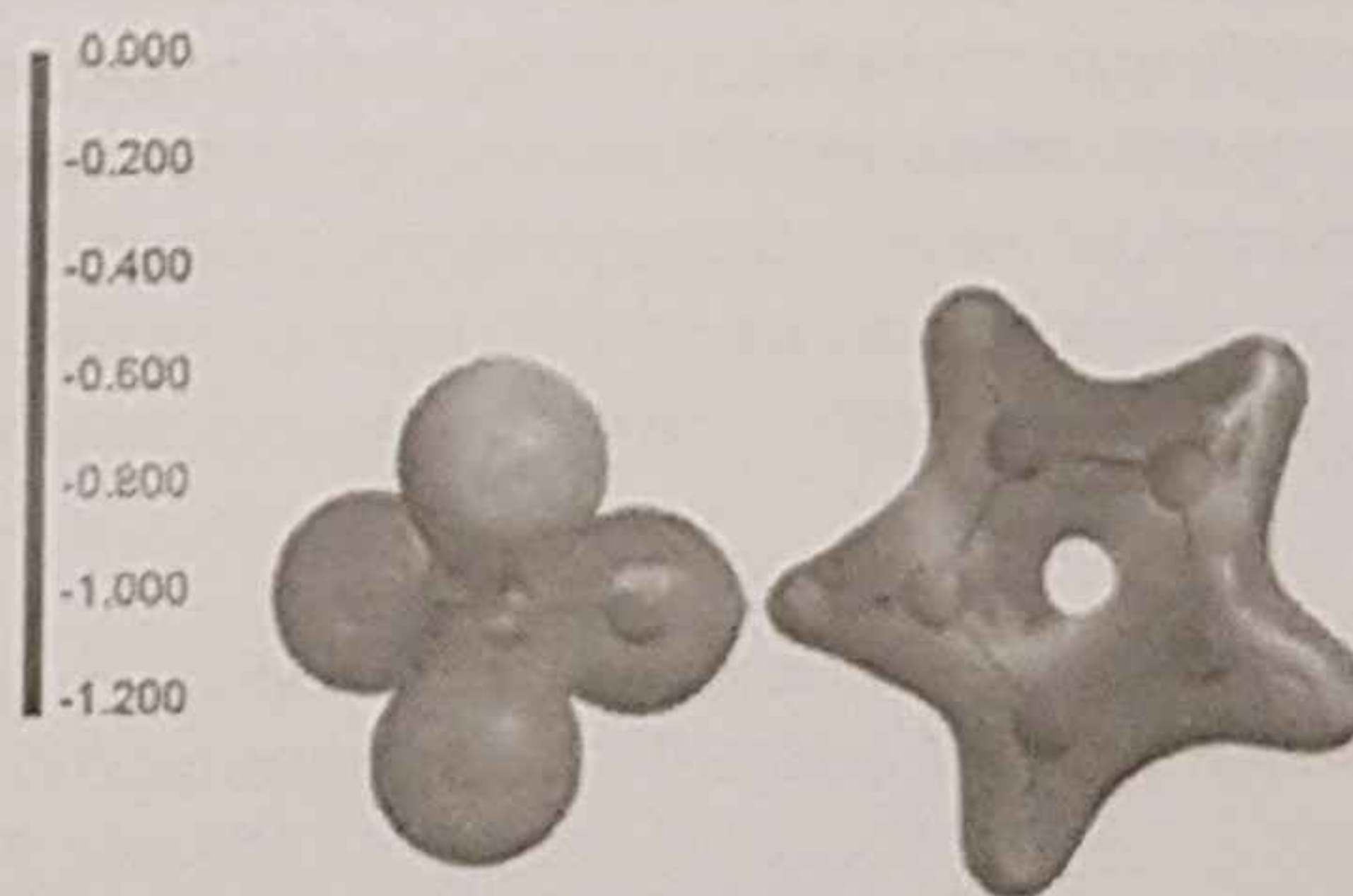


Рис. 1. РАЕМ на изоповерхности электронной плотности, $\rho = 0,055$

Это позволило выявить влияние заместителей в метаноле и имидазоле на химическую связь в исследуемых системах, а также сделать выводы об изменениях характеристик межмолекулярных взаимодействий в исследуемых системах в зависимости от фазы, в которой они находятся.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-74-10056).