

## **Требования к оформлению тезисов докладов**      **ПРИЛОЖЕНИЕ 1** *Тезисы, не отвечающие указанным требованиям, публиковаться не будут.*

В тезисах должна быть представлена следующая информация:

- фамилии всех авторов;
- название и адрес организации, от имени которой делается доклад;
- краткое содержание доклада;
- краткие биографические сведения о докладчике.

Тезисы не должны превышать одной страницы формата А4 (шрифт - Times New Roman, размер - 12, межстрочный интервал - 1,5, поля сверху и снизу – 2 см, поля слева – 3 см, поля справа - 1,5 см) и должны быть изложены **отдельно на русском (1 стр.) и на английском (1 стр.) языках** в одном документе.

Название доклада пишется прописными буквами жирным шрифтом. Фамилия докладчика выделяется подчеркиванием. Инициалы авторов и соавторов ставятся перед фамилией. Название организации, город выделяются курсивом и пишутся через запятую. Данные сведения подаются без точек в конце. Для сносок используется знак \*.

Просьба не использовать в тексте инструменты форматирования Word (красная строка, выделение, подчеркивание, и т.д.), если это не является обязательной терминологической необходимостью. Правила оформления тезисов распространяются на оформление кратких биографических сведений.

Краткие биографические сведения (5-10 строк) о докладчике предоставляются на русском и английском языках соответственно и должны содержать:

- ФИО докладчика (жирным шрифтом);
- академические звания, ученая степень и официальная должность;
- текущее место работы и область деятельности;
- иная публичная, государственная или академическая деятельность;
- прочее (достижения, научные интересы, число публикаций и т.п.).

См. образец оформления тезисов ниже.

Эта информация будет включена в рабочие материалы конференции.

**МЕТОДЫ ХИМИЧЕСКОЙ ИНФОРМАТИКИ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ МИШЕНЬ-СПЕЦИФИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ БИБЛИОТЕК ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

К.В. Балакин, Я.А. Иваненков \*

*Исследовательский институт химического разнообразия, г. Химки, Московская обл.*

*\*Предприятие Контакт-Сервис, г. Долгопрудный, Московская обл.*

Современные методы химической информатики могут быть эффективно использованы для ранней оценки мишень-специфичной активности химических соединений. Исследователи из ИИХР разработали метод раннего прогнозирования ряда фармакологически значимых свойств химических соединений, включая мишень-специфичную активность, ADME/Tox и физико-химические свойства. На целом ряде примеров было показано, что комплексные свойства молекул могут быть эффективно моделированы, используя методы нелинейного картирования и расчетные параметры молекул, такие как электронные, топологические, пространственные и структурные дескрипторы. Построенные модели демонстрируют хорошую прогностическую способность в экспериментах с внутренними и внешними тестовыми выборками, корректно классифицируя 80-90% соединений. Достигнутый уровень точности позволяет использовать эти методы для модификации и оптимизации библиотек соединений при планировании синтеза. Набор алгоритмов для прогнозирования указанных свойств соединений в настоящее время включен в программный комплекс Smart Mining. Эти алгоритмы были использованы и протестированы в ходе целого ряда реальных задач, связанных с ранним прогнозированием активности химических соединений. Они особенно эффективны при необходимости оценки мишень-специфичной активности больших библиотек соединений. В докладе рассмотрены теоретические и практические аспекты разработанного подхода, а также области его применения и ограничения.

**Балакин Константин Валерьевич.** Руководитель отдела компьютерной и медицинской химии Исследовательского института химического разнообразия (ИИХР). Окончил Московский институт тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова в 1993 г. В 1998 г. получил ученую степень кандидата химических наук. С 2005 года – доктор химических наук. Научная деятельность связана с разработкой компьютерных методов прогнозирования фармакологически значимых свойств органических соединений, а также методов дизайна биомишень-специфичных агентов.