

ISSN 2310-6972  
E-ISSN 2310-6905

# Биомедицинская ХИМИЯ

Том  
**65**

Выпуск  
**2**

**ИБМХ**  МОСКВА 2019

# БИОМЕДИЦИНСКАЯ ХИМИЯ

Том 65 выпуск 2 (март-апрель) 2019

*Научно-практический журнал*

*Издаётся 6 раз в год*

*ISSN 2310-6972*

Журнал основан в 1955 году как «Вопросы медицинской химии» (ISSN 0042-8809), переименован в 2003 году, входит в список изданий, рекомендуемых ВАК для публикации результатов диссертационных работ, включён в Российский индекс научного цитирования и представлен в следующих информационно-справочных системах: BIOSIS Preview и Russian Science Citation Index, Scopus, PubMed, EBSCO, Ulrich's Periodicals Directory, Chemical Abstract Service, Index Copernicus International, РИНЦ, Реферативный журнал и база данных ВИНТИ.

Электронная версия журнала (ISSN 2310-6905) доступна по адресу <http://pbmc.ibmc.msk.ru>

Адрес редакции журнала: 119121, Москва, Погодинская ул., дом 10, стр. 7

НИИ биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича

Телефон: +7-495-708-3812; электронная почта: [biomed@ibmc.msk.ru](mailto:biomed@ibmc.msk.ru)

Москва 2019

© 2019 Биомедицинская химия

---

# BIOMEDITSINSKAYA KIMIYA

Volume 65 issue 2 (March-April) 2019

*Scientific journal of biomedical chemistry*

*Published 6 times a year*

*ISSN 2310-6972*

The journal Biomeditsinskaya Khimiya (former Problems of Medical Chemistry, ISSN 0042-8809) is published since 1955. It is indexed/abstracted in BIOSIS Preview and Russian Science Citation Index, Scopus, PubMed, EBSCO, "Ulrich's Periodicals Directory", Chemical Abstract Service, Index Copernicus International, VINITI database.

Online version of journal (ISSN 2310-6905) is available at <http://pbmc.ibmc.msk.ru>

Address: Institute of Biomedical Chemistry, 10 Pogodinskaya street, Moscow, 119121 Russia

Phone: +7-495-708-3812; e-mail: [biomed@ibmc.msk.ru](mailto:biomed@ibmc.msk.ru)

Moscow 2019

© 2019 Biomeditsinskaya Khimiya

---

**Главный редактор:** А.И. Арчаков

**Editor in Chief:** A.I. Archakov

**Первый зам. главн. редактора:** А.Е. Медведев

**First Deputy Editor:** A.E. Medvedev

**Зам. главного редактора:** В.С. Скворцов

**Deputy Editor:** V.S. Skvortsov

**Ответственный секретарь:** В.П. Мирошниченко

**Secretary:** V.P. Miroshnichenko

**Редакционный совет:**

**Advisory Board:**

А.Е. Берман (Москва, Россия)  
Р. Бернхард (Саарбрюкен, Германия)  
Г.Я. Видершайн (Бостон, США)  
В.М. Говорун (Москва, Россия)  
О.А. Гомазков (Москва, Россия)  
А.М. Егоров (Москва, Россия)  
В.В. Ляхович (Новосибирск, Россия)  
Л.Ф. Панченко (Москва, Россия)  
Н.И. Соловьева (Москва, Россия)  
В.А. Ткачук (Москва, Россия)  
В.А. Тутельян (Москва, Россия)  
В.П. Чехонин (Москва, Россия)  
С.А. Усанов (Минск, Беларусь)

A.E. Berman (Moscow, Russia)  
R. Bernhardt (Saarbrücken, Germany)  
G.Y. Wiederschain (Boston, USA)  
V.M. Govorun (Moscow, Russia)  
O.A. Gomazkov (Moscow, Russia)  
A.M. Egorov (Moscow, Russia)  
V.V. Lyakhovich (Novosibirsk, Russia)  
L.F. Panchenko (Moscow, Russia)  
N.I. Solovyeva (Moscow, Russia)  
V.A. Tkachuk (Moscow, Russia)  
V.A. Tutelian (Moscow, Russia)  
V.P. Chekhonin (Moscow, Russia)  
S.A. Usanov (Minsk, Belarus)

**Редакционная коллегия:**

**Editorial Board:**

А. Баранова (Фэрфакс, США)  
Г.М. Верхивкер (Сан-Диего, США)  
А.В. Веселовский (Москва, Россия)  
В.Г. Згода (Москва, Россия)  
А.С. Иванов (Москва, Россия)  
О.М. Ипатова (Москва, Россия)  
Е.Н. Калинин (Минск, Беларусь)  
А. Кель (Вольфенбюттель, Германия)  
А.В. Лисица (Москва, Россия)  
С.А. Мошковский (Москва, Россия)  
В. В. Пороиков (Москва, Россия)  
А.Б. Салмина (Красноярск, Россия)  
А.А. Фильченков (Киев, Украина)  
В.А. Хрипач (Минск, Беларусь)  
В.М. Шкуматов (Минск, Беларусь)  
В.В. Шумянцева (Москва, Россия)  
В. Урлахер (Дюссельдорф, Германия)  
К.Н. Ярыгин (Москва, Россия)

A. Baranova (Fairfax, USA)  
G.M. Verkhivker (San Diego, USA)  
A.V. Veselovsky (Moscow, Russia)  
V.G. Zgoda (Moscow, Russia)  
A.S. Ivanov (Moscow, Russia)  
O.M. Ipatova (Moscow, Russia)  
E.N. Kalinichenko (Minsk, Belarus)  
A. Kel (Wolfenbuettel, Germany)  
A.V. Lisitsa (Moscow, Russia)  
S.A. Moshkovskiy (Moscow, Russia)  
V. V. Poroikov (Moscow, Russia)  
A.B. Salmina (Krasnoyarsk, Russia)  
A.A. Philchenkov (Kyiv, Ukraine)  
V.A. Khripach (Minsk, Belarus)  
V.M. Shkumatov (Minsk, Belarus)  
V.V. Shumyantseva (Moscow, Russia)  
V. Urlacher (Düsseldorf, Germany)  
K.N. Yarigin (Moscow, Russia)

---

**Сдано в набор 20.03.2019 г. Подписано в печать 01.04.2019 г. Формат 108x70/1/16  
Печать ризографическая. Печ. Л. 6. Уч. Изд. л. 8,7 Тираж 250  
“ИБМХ”**

**Москва, Погодинская, 10.  
Отпечатано в типографии издательско-полиграфического комплекса**

СОДЕРЖАНИЕ		CONTENTS
ВСТУПИТЕЛЬНАЯ СТАТЬЯ	71-72	EDITORIAL
БИОИНФОРМАТИКА И ХЕМОИНФОРМАТИКА		BIOINFORMATICS AND CHEMOINFORMATICS
П.И. Савосина, Л.А. Столбов, Д.С. Дружиловский, Д.А. Филимонов, М. Никлаус, В.В. Поройков <i>Поиск новых антиретровирусных соединений в химическом пространстве “больших данных” библиотеки SAVI</i>	73-79	P.I. Savosina, L.A. Stolbov, D.S. Druzhilovskiy, D.A. Filimonov, M.C. Nicklaus, V.V. Poroikov <i>Discovering new antiretroviral compounds in “Big Data” chemical space of the SAVI library</i>
А.В. Сулимов, Д.К. Кутов, И.С. Ильин, В.Б. Сулимов <i>Докинг с комбинированным применением силового поля и квантово-химического метода</i>	80-85	A.V. Sulimov, D.K. Kutov, I.S. Ilin, V.B. Sulimov <i>Docking with combined use of a force field and a quantum-chemical method</i>
Н.А. Зефирова, Е.А. Лаврушкина, С.А. Кузнецов, О.Н. Зефирова <i>Аналог подофиллотоксина с бицикло[3.2.1]октановой группировкой, аннелированной с индолом: синтез, молекулярное моделирование и биотестирование</i>	86-90	N.A. Zefirov, E.A. Lavrushkina, S.A. Kuznetsov, O.N. Zefirova <i>Podophyllotoxin analogue with bicyclo[3.2.1]octane moiety annelated with indole: synthesis, molecular modeling, and biological testing</i>
П.М. Васильев, А.А. Спасов, Л.Р. Яналиева, А.Н. Кочетков, В.В. Ворфоломеева, В.Г. Клочков, Д.Т. Аппазова <i>Нейросетевое моделирование мультитаргетной RAGE-ингибирующей активности</i>	91-98	P.M. Vassiliev, A.A. Spasov, L.R. Yanaliyeva, A.N. Kochetkov, V.V. Vorfolomeyeva, V.G. Klochkov, D.T. Appazova <i>Neural network modeling of multitarget RAGE inhibitory activity</i>
Ю.В. Бутина, Т.В. Кудаярова, Е.А. Данилова, М.К. Исляйкин <i>Прогнозирование спектра биологической активности и антимикробные свойства диаминоазолов</i>	99-102	Yu.V. Butina, T.V. Kudayarova, E.A. Danilova, M.K. Islyaikin <i>The prediction of the spectrum of biological activity and antimicrobial properties of diaminoazoles</i>
Ю.З. Мартынова, В.Р. Хайруллина, А.Р. Гимадиева, А.Г. Мустафин <i>QSAR-моделирование ингибиторов дезоксидинтрифосфатазы в ряду некоторых производных урацила</i>	103-113	Yu.Z. Martynova, V.R. Khairullina, A.R. Gimadiev, A.G. Mustafin <i>QSAR-modeling of desoxyuridine triphosphatase inhibitors in a series of some derivatives of uracil</i>
А.В. Рудик, А.В. Дмитриев, А.А. Лагунин, С.М. Иванов, Д.А. Филимонов, В.В. Поройков <i>Компьютерная оценка токсичности ксенобиотиков с учётом их метаболизма в организме человека</i>	114-122	A.V. Rudik, A.V. Dmitriev, A.A. Lagunin, S.M. Ivanov, D.A. Filimonov, V.V. Poroikov <i>Xenobiotic toxicity prediction combined with xenobiotic metabolism prediction in the human body</i>
О.В. Тиньков, В.Ю. Григорьев, П.Г. Полищук, А.В. Ярков, <u>О.А. Раевский</u> <i>QSAR-анализ острой токсичности органических соединений при пероральном введении мышам</i>	123-132	O.V. Tinkov, V.Yu. Grigorev, P.G. Polishchuk, A.V. Yarkov, <u>O.A. Raevsky</u> <i>QSAR investigation of acute toxicity of organic compounds during oral administration to mice</i>
Б.Д. Большчиков, В.Б. Цветков, О.Л. Алиханова, А.В. Сербин <i>Расчётно-теоретический анализ изомеризационной цикломимикрии лекарственно-перспективных олигомеров “ДИВЭМА” в процессе их свободно-радикального синтеза</i>	133-151	B.D. Bolshchikov, V.B. Tsvetkov, O.L. Alikhanova, A.V. Serbin <i>Modeling and theoretical analysis of ring specific mimicry in view of isomerism within medicinal promising oligomers of “DIVEMA”</i>
Р.П. Терехов, И.А. Селиванова, А.К. Жевлакова, Ю.Б. Порозов, А.В. Дзубан <i>Анализ физических модификаций дигидрокверцетина in vitro и in silico</i>	152-158	R.P. Terekhov, I.A. Selivanova, A.K. Zhevlakova, Yu.B. Porozov, A.V. Dzuban <i>Analysis of dihydroquercetin physical modification via in vitro and in silico methods</i>
Памяти О.А. Раевского	159	In memory of O.A. Raevsky

