

ISSN 2310-6972
E-ISSN 2310-6905

Biomeditsinskaya Khimiya

Volume

70

Issue

6

IBMC 

MOSCOW 2024

БИОМЕДИЦИНСКАЯ ХИМИЯ

Том 70 выпуск 6 (ноябрь-декабрь) 2024

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 ВИНИТИ.

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

Москва 2024

© 2024 Биомедицинская химия

BIOMEDITSINSKAYA KIMIYA

Volume 70 issue 6 (November-December) 2024

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

Moscow 2024

© 2024 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

Исполнительный редактор: В.П. Мирошниченко

Executive Editor: V.P. Miroshnichenko

Редакционный совет:

Advisory Board:

А.Е. Берман (Москва, Россия)
Р. Бернхард (Саарбрюкен, Германия)
В.М. Говорун (Москва, Россия)
О.А. Гомазков (Москва, Россия)
А.М. Егоров (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)
V.M. Govorun (Moscow, Russia)
O.A. Gomazkov (Moscow, Russia)
A.M. Egorov (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)
Д.Д. Жданов (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)
D.D. Zhdanov (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)

Литературный редактор: К.А. Стефанович

Literary Editor: K.A. Stefanovich

Вёрстка: С.О. Ревтов

Layout Designer: S.O. Revtov

Вебмастер: А.В. Рыбина

Webmaster: A.V. Rybina

Свидетельство о регистрации средства массовой информации серия ПИ № ФС77-82357 от 10.12.2021 г.,
выдано Федеральной службой по надзору в сфере
связи, информационных технологий и массовых коммуникаций

Подписано к печати: 20.12.2024

Формат: 108×70 1/16

Усл. печ. л: 9,28

Тираж 50 экз.

Цена свободная

Учредитель: Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»

Издатель: Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»,
119121, Москва, ул. Погодинская, д. 10, стр. 8

Отпечатано в типографии «УниверПринт»,
117292, Москва, ул. Кедрова, д. 14, кор. 1

СОДЕРЖАНИЕ	CONTENTS
ОБРАЩЕНИЕ РЕДАКТОРОВ ВЫПУСКА	379–380 EDITORS' INTRODUCTION TO THE ISSUE
ОБЗОР	REVIEW
И.А. Соловьёв, Д.А. Голубев <i>Хронобиотики: классификации существующих модуляторов циркадных ритмов, перспективы на будущее</i>	381–393 I.A. Solovev, D.A. Golubev <i>Chronobiotics: classifications of existing circadian clock modulators, future perspectives</i>
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ	EXPERIMENTAL STUDIES
Ф.А. Балабин, Ю.-Д.Д. Коробкина, С.В. Галкина, М.А. Пантелеев, А.Н. Свешникова <i>Персонализация вычислительной системно-биологической модели кальциевой сигнализации тромбоцитов</i>	394–402 F.A. Balabin, J.D.D. Korobkina, S.V. Galkina, M.A. Pantelev, A.N. Sveshnikova <i>Personalization of a computational systems biology model of blood platelet calcium signaling</i>
С.М. Иванов, А.А. Лагунин, В.В. Пороиков <i>Репозиционирование лекарств для терапии большого депрессивного расстройства на основе прогноза лекарственно-индуцированных изменений экспрессии генов</i>	403–412 S.M. Ivanov, A.A. Lagunin, V.V. Poroikov <i>Repositioning of drugs for the treatment of major depressive disorder based on prediction of drug-induced gene expression changes</i>
А.С. Саргсян, Л.Т. Карапетян, А.В. Мхитарян, Л.А. Стеpanyan, Т.О. Саргсян, Ю.М. Дангян, А.В. Саргсян, Г.Г. Оганезова, Н.А. Оганесян <i>Моделирование, синтез и in vitro тестирование пептидов на основе небелковых аминокислот в качестве потенциальных антибактериальных соединений</i>	413–420 A.S. Sargsyan, L.T. Karapetyan, A.V. Mkhitarian, L.A. Stepanyan, T.H. Sargsyan, Yu.M. Danghyan, A.V. Sargsyan, G.G. Oganezova, N.A. Hovhannisyanyan <i>Modeling, synthesis and in vitro testing of peptides based on unusual amino acids as potential antibacterial agents</i>
Т.И. Мулашкина, М.С. Леонова, М.Г. Хренова <i>Конформационная динамика фермент-субстратного комплекса протеинкиназы А с псевдосубстратом SP20 и аденозинтрифосфатом</i>	421–427 T.I. Mulashkina, M.S. Leonova, M.G. Khrenova <i>Conformational dynamics of the enzyme-substrate complex of protein kinase A with pseudosubstrate SP20 and adenosine triphosphate</i>
П.М. Васильев, М.А. Перфильев, А.В. Голубева, А.Н. Кочетков, Д.В. Мальцев <i>Мультицелевая нейросетевая модель анксиолитической активности химических соединений на основе корреляционной свёртки спектров энергий множественного докинга</i>	428–434 P.M. Vassiliev, M.A. Perfiliev, A.V. Golubeva, A.N. Kochetkov, D.V. Maltsev <i>Multi-target neural network model of anxiolytic activity of chemical compounds using correlation convolution of multiple docking energy spectra</i>
В.Л. Алмейда, О.Д.Х. дос Сантос, Х.С.Д. Лопес <i>Крупномасштабное предсказание биологической активности с использованием системы Active-IT</i>	435–441 V.L. Almeida, O.D.H. dos Santos, J.C.D. Lopes <i>Large-scale prediction of biological activities with Active-IT system</i>
М.О. Даниян, О.Б. Адеое, Э. Осирим, И.Д. Асиянбола <i>Влияние горького мёда на инфламмасом-зависимую гибель клеток при церебральной малярии: оценка на основе сетевой фармакологии</i>	442–455 M.O. Daniyan, O.B. Adeoye, E. Osirim, I.D. Asiyanybola <i>The effect of bitter honey against cerebral malaria-induced inflammasome cell death: network pharmacology-based in silico evaluation</i>
А.Д. Фомина, В.А. Палюлин, Д.И. Осолодкин <i>Моделирование структуры белка NSI ортофлавиринов по гомологии для виртуального скрининга потенциальных лигандов</i>	456–468 A.D. Fomina, V.A. Palyulin, D.I. Osolodkin <i>Homology modeling of the orthoflavivirus NSI protein for virtual screening of potential ligands</i>
О.А. Тарасова, Н.Ю. Бизиуква, Е.А. Столбова, Л.А. Столбов, Р.Р. Такташов, Д.А. Карасев, Н.С. Ионов, С.М. Иванов, А.В. Дмитриев, А.В. Рудик, Д.С. Дружиловский, Б.Н. Соболев, Д.А. Филимонов, В.В. Пороиков <i>Извлечение информации о взаимодействии вирусов с организмом человека и о противовирусных соединениях на основе интеллектуального анализа больших коллекций текстов</i>	469–474 O.A. Tarasova, N.Yu. Biziukova, E.A. Stolbova, L.A. Stolbov, R.R. Taktashov, D.A. Karasev, N.S. Ionov, S.M. Ivanov, A.V. Dmitriev, A.V. Rudik, D.S. Druzhilovskiy, B.N. Sobolev, D.A. Filimonov, V.V. Poroikov <i>Extracting information on virus-human interactions and on antiviral compounds based on automated analysis of large text collections</i>

А.В. Рыбина

*Идентификация протеоформ мозга мышей:
сравнение данных 2D-электрофореза и
независимого эксперимента
с масс-спектрометрической идентификацией*

475–480

A.V. Rybina

*Identification of mouse brain proteoforms: comparison
of 2D-electrophoresis data and independent
experiment with mass spectrometric identification*