XXIII ЕЖЕГОДНАЯ МОЛОДЕЖНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ
ИБХФ РАН-ВУЗЫ

“БИОХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА”

20-22 НОЯБРЯ 2023
МОСКВА

XXIII ЕЖЕГОДНАЯ МОЛОДЕЖНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ ИБХФ РАН-ВУЗЫ
“БИОХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА”

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Курочкин Илья Николаевич, профессор., д.х.н.,
директор ИБХФ РАН, председатель
Квашнин Дмитрий Геннадьевич, д.ф.-м.н., ИБХФ РАН
Квашнин Александр Геннадьевич, д.ф.-м.н., Сколтех, ИХР РАН
Чернозатонский Леонид Александрович, профессор,
д.ф.-м.н., ИБХФ РАН
Попов Захар Иванович, к.ф.-м.н., ИБХФ РАН
Трофимов Алексей Владиславович, д.х.н.,
заместитель директора ИБХФ РАН
Варфоломеев Сергей Дмитриевич, чл.-корр. РАН, ИБХФ РАН
Островский Михаил Аркадьевич, академик РАН, ИБХФ РАН
Попов Анатолий Анатольевич, профессор, д.х.н., ИБХФ РАН
Тихонов Александр Николаевич, профессор, д.ф.-м.н., ИБХФ РАН
Тимохина Елена Николаевна, к.ф.-м.н., ИБХФ РАН
Астахова Татьяна Юрьевна, к.х.н., ИБХФ РАН
Скалацкая Светлана Ивановна, к.б.н., ИБХФ РАН

ОРГКОМИТЕТ

Недоспасова Людмила Владимировна, к.х.н., ИБХФ РАН,
председатель оргкомитета конференции
Тимохина Елена Николаевна, к.ф.-м.н., ИБХФ РАН
Астахова Татьяна Юрьевна, к.х.н., ИБХФ РАН
Демин Виктор Александрович, н.с., ИБХФ РАН
Тертышная Юлия Викторовна, к.х.н., ИБХФ РАН
Сультимова Наталья Борисовна, к.х.н., ИБХФ РАН
Константинова Марина Львовна, н.с., ИБХФ РАН

XXIII ЕЖЕГОДНАЯ МОЛОДЕЖНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ ИБХФ РАН-ВУЗЫ "БИОХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА"

НАУЧНАЯ ПРОГРАММА

20 ноября 2023г.

10^{30}-10^{40} ***Открытие конференции, вступительное слово***
Курочкин Илья Николаевич, д.х.н., директор ИБХФ РАН

10^{40}-11^{15} **Приглашенный доклад**
Чугреев Андрей Львович, д.ф.-м.н.
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
Новая концепция полуэмпиризма в химии и науках о материалах. Философия, предпосылки и текущее положение

Секция: Компьютерное моделирование биомолекулярных систем и наноматериалов памяти д.х.н., профессора Александра Владимировича Немухина
Председатель – Поляков Игорь Вадимович

Александр Владимирович ученый высочайшего класса, педагог, инициатор и организатор ряда важных мероприятий, направленных на развитие российской квантово-химической школы, привлечение молодежи в науку, расширение и укрепление научных связей внутри отечественного квантово-химического сообщества.
Он широко известен у нас в стране и за рубежом своими трудами по молекулярной динамике сложных биологических систем и квантово-химическим исследованиям процессов в живой материи.

12^{45}-13^{00} **Кусочек Павел Александрович,** МГУ

Исследование влияния белкового окружения на фотодинамику возбужденных состояний хромофорных групп светочувствительных белков родопсинов

Хромофор родопсинов - протонированное основание Шиффа ретиналя, изомеризующееся при поглощении фотона. В исследовании с помощью комбинированных методов квантовой и молекулярной механики установлено, что белковое окружение разных родопсинов обеспечивает возбуждение определенных колебательных мод в хромофоре, что способствует фотоизомеризации.

13^{00}-13^{15} **Мулашкина Татьяна Игоревна,** МГУ

Сверточная нейронная сеть для определения активации субстрата ферментом по картам лапласиана электронной плотности

Для протекания химических реакций, катализируемых ферментами, необходимо, чтобы произошла активация субстрата в активном центре фермента. Её наличие можно определить по анализу карт лапласиан электронной плотности, рассчитанных в реакционной области. В данной работе была разработана свёрточная нейронная сеть, способная различать реакционноспособные и нереакционноспособные фермент-субстратные комплексы.

13^{15}-13^{30} **Степанюк Роман Алексеевич,** МГУ

Механизм превращения аденозинтрифосфата в циклический аденозинмонофосфат в активном центре аденилатциклазы

Для изучения механизма реакции превращения аденозинтрифосфата (ATP) в циклический аденозинмонофосфат (cAMP) в активном центре аденилатциклазы использовался подход молекулярной динамики с КМ/ММ потенциалами (КМ/ММ МД) с добавлением смещающего потенциала методом umbrella sampling. Получен профиль энергии Гиббса и описан молекулярный механизм реакции.

13^{30}-14^{00} **Обед**