

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ОДИН ИЗ СПОСОБОВ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СИНТЕЗА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МОЛЕКУЛ

© Акобян Давид Араевич

Научный руководитель: к.х.н., доцент З.М. Саркисян  
Факультет информатики  
Ереванский государственный университет архитектуры и строительства

**Контактная информация:** Акобян Давид Араевич — студент 3 курса факультета информатики, e-mail: david.hakobyan1237@gmail.com

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, лизиновые дендриграфты, антиамилоидные структуры

**Актуальность исследования:** цифровизация всех сфер жизни набирает все большие обороты [4], прогнозирование биологической активности и механизмов действия биологически активных веществ является одним из злободневных направлений в науке на сегодняшний день.

**Цель исследования:** рассмотреть компьютерное моделирование как один из способов прогнозирования синтеза перспективных биологически активных веществ.

**Материалы и методы:** обзор и анализ статей.

**Результаты:** анализ литературы показал возможность прогнозирования биологической активности молекул, исходя из их строения. Так, в работе [1] проверена возможность разрушения пептидных агрегатов с помощью лизиновых дендриграфтов в двух системах молекул 8 и 16 амилоидов в растворе. Данное исследование открывает широкие перспективы в синтезе лекарственных препаратов, направленных на лечение болезни Альцгеймера, т.е. антиамилоидных структур.

С другой стороны компьютерное моделирование интенсивно используется в вычислительных технических приемах, например, с помощью него, используя теорию функционала электронной плотности расчета сопряженных полимеров с учетом n-p- взаимодействия, оказалось возможным воспроизвести структуру полимеров с максимальной точностью [2].

Авторы [3] исследуя кинетику реакций, в частности SN, предполагают, что подавляющее большинство молекулярных столкновений являются упругими, образование продукта реакции предопределяется рандомизированными в распределении Максвелла-Больцмана. Исходя из вычислений, представляется возможным игнорировать нереакционноспособные молекулы. Т.е. данная работа помогает сразу отсеять варианты реакций, в ходе которых нет продуктов данной реакции.

**Выводы:** компьютерное моделирование протекания реакций, расчеты, связанные с прогнозированием механизма реакции, позволяют с математической точки зрения приблизить успех в синтезе нужных молекул разной биоактивности.

### Литература

1. Ильяш М.Ю., Хамидова Д.Н., Безродный В. В., Фатуллаев Э.И., Михтанюк С.Е., Неелов И.М. Известия СПбГТИ(ТУ). 2019. № 50(76). С. 85–91.
2. Алексеев В.Г., Бабуркин П.О., Tung S.-H., Комаров П.В. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2021. Вып. 13. С. 534–540.
3. Gillespie D. T. Annual Review of Physical Chemistry. 2007. 58(1). P. 35–55.
4. Ворона, Е. А. Компьютерное моделирование фолдинга белка как способ решения проблем, вызванных дефектными белками / Е. А. Ворона, В. В. Полуэктова // Forcipe. — 2021. — Т. 4. — № S1. — С. 469. — EDN TALVNB.