

БНЦ



**ИЗБРАННЫЕ ТРУДЫ  
ДОКТОРА ХИМИЧЕСКИХ НАУК,  
ПРОФЕССОРА О.А. РАЕВСКОГО  
В ОБЛАСТИ МОЛЕКУЛЯРНОГО  
КОМПЬЮТЕРНОГО ДИЗАЙНА**

Москва  
2021

УДК 74; 544  
ББК 24.5; 85с  
Р16

**Избранные труды доктора химических наук, профессора О.А. Раевского в области молекулярного компьютерного дизайна / – М.: РАН, 2021 – 228 с., 35 илл.**

# СОДЕРЖАНИЕ

О ПРОФЕССОРЕ О.А. РАЕВСКОМ .....	5
ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ В ВИДЕ СПЕКТРА МЕЖАТОМНЫХ РАССТОЯНИЙ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СВЯЗИ «СТРУКТУРА – БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ» .....	7
ВОЗМОЖНОСТИ И ПЕРСПЕКТИВЫ КОНСТРУИРОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ .....	18
НОВЫЕ КССА ДЕСКРИПТОРЫ, РАССЧИТЫВАЕМЫЕ ИЗ СПЕКТРОВ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ .....	49
КЛАССИФИКАЦИОННЫЕ И КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ МОДЕЛИ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРЫ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И ИХ ТОКСИЧНОСТИ ПО ОТНОШЕНИЮ К <i>DAPHNIA MAGNA</i> .....	56
РАЗВИТИЕ МОДЕЛЕЙ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРЫ И ТОКСИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПО ОТНОШЕНИЮ К <i>GUPPY</i> .....	71
ФРАКТАЛЬНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ ГИСТОГРАММ МЕЖАТОМНЫХ РАССТОЯНИЙ – НОВЫЙ 3D-ДЕСКРИПТОР МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ .....	82
КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРЫ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И ИХ ИНГАЛЯЦИОННОЙ ТОКСИЧНОСТИ .....	94
РЕКУРРЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ В ГОМОЛОГИЧЕСКИХ РЯДАХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ...	103
КОМПЬЮТЕРНЫЕ КЛАССИФИКАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРЫ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И ЛЕКАРСТВ С ИХ СПОСОБНОСТЬЮ ПРОНИКАТЬ ЧЕРЕЗ ГЕМАТОЭНЦЕФАЛИЧЕСКИЙ БАРЬЕР .....	113
ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ СВЯЗИ МЕЖДУ ФУНКЦИЕЙ РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И КРИВОЙ ДАВЛЕНИЯ НАСЫЩЕННОГО ПАРА В РЯДУ <i>n</i> -АЛКАНОВ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ .....	128
ОЦЕНКА ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПРИ ВНУТРИВЕННОМ ВВЕДЕНИИ ПО ОТНОШЕНИЮ К МЫШАМ НА ОСНОВЕ МЕЖВИДОВЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ, ПАРАМЕТРОВ ЛИПОФИЛЬНОСТИ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ДЕСКРИПТОРОВ .....	138

<b>КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОНИЦАЕМОСТИ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ЧЕРЕЗ ГЕМАТОЭНЦЕФАЛИЧЕСКИЙ БАРЬЕР .....</b>	<b>149</b>
<b>КЛАССИФИКАЦИОННЫЕ QSAR-МОДЕЛИ ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПО ОТНОШЕНИЮ К <i>DAPHNIA MAGNA</i> .....</b>	<b>172</b>
<b>КОМПЬЮТЕРНЫЙ РАСЧЕТ ПРОНИЦАЕМОСТИ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ ЧЕРЕЗ ГЕМАТОЭНЦЕФАЛИЧЕСКИЙ БАРЬЕР .....</b>	<b>179</b>
<b>КЛАССИФИКАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРЫ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ И ИХ Р-ГЛИКОПРОТЕИНОВОЙ АКТИВНОСТИ .....</b>	<b>185</b>
<b>QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСТРОЙ НЕЙРОТОКСИЧНОСТИ РЯДА ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ ПО ОТНОШЕНИЮ К ГРЫЗУНАМ .....</b>	<b>195</b>
<b>QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ БЛОКАДЫ НМДА-РЕЦЕПТОРА ПОЛИФАРМАКОФОРНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ КАРБАЗОЛА И 1-АМИНОДАМАНТАНА .....</b>	<b>203</b>
<b>КОМПЬЮТЕРНЫЕ РЕГРЕССИОННЫЕ МОДЕЛИ Р-ГЛИКОПРОТЕИНОВОГО ТРАНСПОРТА ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ .....</b>	<b>208</b>
<b>ИССЛЕДОВАНИЕ КАНАЛЬНЫХ БЛОКАТОРОВ NMDA-РЕЦЕПТОРА В РЯДУ КОНЪЮГАТОВ МЕТИЛЕНОВОГО СИНЕГО С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ QSAR И МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ .....</b>	<b>217</b>