

11-14.01.92

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ИНСТИТУТ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

---

IX ВСЕСОЮЗНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
**ХИМИЧЕСКАЯ ИНФОРМАТИКА**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ И ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

Часть I

11—15 января 1992 г.  
Черноголовка

## СКРИННЫ В МОДЕЛИРОВАНИИ СТРУКТУРА-СВОЙСТВО.

Соловьев В. П.

Институт физиологически активных веществ АН СССР,  
142432, Черноголовка

Подходы с использованием топологии и теории графов все шире используются в моделировании структура-свойство. В частности, топологические индексы хорошо коррелируют с широким набором физико-химических параметров [1]. Другим таким направлением в описании и предсказании свойств веществ является использование подграфов молекулярных графов.

Для моделирования структура-свойство разработан пакет программ TRAIL, который позволяет на основе машиночитаемого файла молекулярных графов, описывающих структурные формулы веществ, рассчитать их подграфы (скринны). Для массива веществ формируется таблица скриннов, в которой содержатся типы и число подструктур для каждого вещества. В качестве подструктур могут быть рассчитаны: 1) все кратчайшие расстояния в молекуле между каждой парой атомов, выраженные в форме цепочек атом-связь-атом..., атом-атом... или связь-связь..., 2) ближайшее окружение каждого атома, учитывающее ближайшее окружение связями, ближайшее атомное окружение или атомно-связевое окружение. Этот подход позволяет оценивать свойства веществ по аддитивным, мультипликативно-аддитивным и т.п. вкладам скриннов. Здесь для массива веществ с известными свойствами программа TRAIL позволяет рассчитать все подструктуры, их вклады в интересующее свойство и построить корреляционное уравнение, связывающее свойство с подструктурными вкладами. Метод проверен в моделировании физико-химических свойств алканов и термодинамика комплексообразования ионов кадмия с различными лигандами [2].

Возможен формально-логический подход по оценке вкладов скриннов в свойства веществ по типу фармакофоров. Скринны могут содержать данные о пространственной структуре соединений, применяемые, в частности, в конформационном анализе. Подход может быть использован для структурного поиска в химических фактографических базах данных. Используемый язык - ТУРБО-ПАСКАЛЬ.

1. Топология и приложения топологии и теории графов. /Под ред. Р.Кинга. - М.: Мир, 1987. - 560 с.

2. Соловьев В. П., Савицкий А. М., Чистяков В. В., Соловьев В. П., Соловьев В. П. // Журнал химии - 1992. - Т. 10. - В. 1. - С. 100-101.