



(H)	
Li ³ ЛИТИЙ	Be ⁴ БЕРИЛЛИЙ
Na ¹¹ НАТРИЙ	Mg ¹² МАГНИЙ
K ¹⁹ КАЛИЙ	Ca ²⁰ КАЛЬЦИЙ
29 Cu МЕДЬ	30 Zn ЦИНК
Rb ³⁷ РУБИДИЙ	Sr ³⁸ СТРОНЦИЙ
47 Ag СЕРЕБРО	48 Cd КАДМИЙ
Cs ⁵⁵ ЦЕЗИЙ	Ba ⁵⁶ БАРИЙ
79 Au ЗОЛОТО	80 Hg РТУТЬ
Fr ⁸⁷ ФРАНЦИЙ	Ra ⁸⁸ РАДИЙ

ТОМ 54

ВЫП. 10

ISSN 0579-2991

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

СЕРИЯ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Иваново 2011

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
ИЗДАНИЕ ИВАНОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

**ХИМИЯ
И
ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕХНОЛОГИЯ**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ
Основан в январе 1958 года. Выходит 12 раз в год.

**Том 54
Вып. 10**

Иваново 2011

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор О.И. Койфман (*д.х.н., профессор, член-корр. РАН*)

Зам. гл. редактора В.Н. Пророков (*к.х.н.*)

Зам. гл. редактора В.В. Рыбкин (*д.х.н., профессор*)

Зам. гл. редактора А.П. Самарский (*к.х.н.*)

Зав. редакцией А.С. Манукян (*к.т.н.*)

В.К. Абросимов (*д.х.н., проф.*), М.И. Базанов (*д.х.н., проф.*), Б.Д. Березин (*д.х.н., проф.*),
В.Н. Блиничев (*д.т.н., проф.*), С.П. Бобков (*д.т.н., проф.*), В.А. Бурмистров (*д.х.н., проф.*),
Г.В. Гиричев (*д.х.н., проф.*), О.А. Голубчиков (*д.х.н., проф.*), М.В. Ключев (*д.х.н., проф.*),
А.М. Колкер (*д.х.н., проф.*), А.Н. Лабукин (*д.т.н., проф.*), Т.Н. Ломова (*д.х.н., проф.*),
Л.Н. Мизеровский (*д.х.н., проф.*), В.Е. Мизонов (*д.т.н., проф.*), В.И. Светцов (*д.х.н., проф.*),
Ф.Ю. Телегин (*д.х.н., проф.*), М.В. Улитин (*д.х.н., проф.*), В.А. Шарнин (*д.х.н., проф.*)

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

проф. Дудырев А.С. (г. Санкт-Петербург)

проф. Дьяконов С.Г. (г. Казань)

акад. РАН Егоров М.П. (г. Москва)

акад. РАН Еременко И.Л. (г. Москва)

проф. Захаров А.Г. (г. Иваново)

член-корр. РАН Новаков И.А. (г. Волгоград)

акад. РАН Новоторцев В.М. (г. Москва)

член-корр. РАН Овчаренко В.И. (г. Новосибирск)

акад. РАН Саркисов П.Д. (г. Москва)

акад. РАН Синяшин О.Г. (г. Казань)

проф. Тимофеев В.С. (г. Москва)

акад. РААСН Федосов С.В. (г. Иваново)

Издание Ивановского государственного химико-технологического университета, 2011

Адрес редакции: 153000, г. Иваново, пр. Фридриха Энгельса, 7, тел. 8(4932)32-73-07, E-mail: ivkkt@isuct.ru,
<http://CTJ.isuct.ru>

Редактор: Н.Ю. Спиридонова
Технический редактор: М.В. Тимачкова
Англ. перевод: В.В. Рыбкин
Компьютерная верстка: А.С. Манукян

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору за соблюдением законодательства
в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-24169 от 20 апреля 2006 г.

Журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук»

Журнал издается при содействии Академии инженерных наук им. А.М. Прохорова

Подписано в печать 25.08.2011. Формат бумаги 60x84 ¹/₈.

Печать офсетная. Усл. печ. л. 12,6. Усл. кр.-отт. 18,34. Учетно-изд. л. 15,12. Тираж 450 экз. Заказ 635.

Отпечатано с диапозитивов в ОАО «Ивановская областная типография». 153008, г. Иваново, ул. Типографская, 6.

Подписка: ОАО Агентство «РОСПЕЧАТЬ» (подписной индекс 70381),
ООО «Научная электронная библиотека» (www.e-library.ru).

©Изв. вузов. Химия и химическая технология, 2011

УДК 547.022+615.07

Т.Г. Волкова, Я.А. Иваненков, К.В. Балакин, Н.А. Магдалинова, М.В. Ключев

**ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ:
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ПРАКТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДОЛОГИИ***

Статья представляет собой обзор работ, отражающих современное состояние исследований в области прогнозирования фармакологических свойств химических соединений, в том числе и применения алгоритмов картирования, позволяющих анализировать сложные зависимости между свойствами соединений и их структурными особенностями.



Волкова Татьяна Геннадьевна -
к.х.н., доцент кафедры органической
и биологической химии Ивановского
государственного университета
Область научных интересов: структу-
ра и реакционная способность орга-
нических соединений
тел.: +7(4932) 37-37-03,
e-mail: tgvolkova@yandex.ru



Иваненков Ян Андреевич -
к.б.н., инженер-исследователь лаборато-
рии научно-информационных технологий в
медицинской химии Института физиологи-
чески активных веществ РАН (г. Черного-
ловка)
Область научных интересов: компьютерная
и медицинская химии, разработка физиоло-
гически активных веществ
тел.: +7(495)524-25-63,
e-mail: smart_people@inbox.ru



Балакин Константин Валерьевич -
д.х.н., заведующий лабораторией
научно-информационных технологий
в медицинской химии Института фи-
зиологически активных веществ РАН
Область научных интересов: компью-
терная и медицинская химии, разра-
ботка физиологически активных ве-
ществ
тел.: +7(495)524-25-63,
e-mail: balakin@ipac.ac.ru



Магдалинова Наталья Александровна -
к.х.н., инженер кафедры органической и
биологической химии Ивановского госу-
дарственного университета
Область научных интересов: синтез, струк-
тура и реакционная способность органиче-
ских соединений
тел.: +7(4932)37-37-03,
e-mail: mn2408@mail.ru



Ключев Михаил Васильевич -
д.х.н., декан биолого-химического факультета, зав. кафедрой органической и биологической химии
Ивановского государственного университета
Область научных интересов: синтез, структура и реакционная способность органических соединений
тел.: +7(4932)37-01-57,
e-mail: klyuev@inbox.ru

Ключевые слова: биологическая активность, основания Шиффа, соотношение «структура – свойство»

ВВЕДЕНИЕ

Современная органическая химия представляет собой зрелую, весьма развитую научную дисциплину, которая обладает мощным теоретическим фундаментом, широким арсеналом синтетических и аналитических методов, а также, что особенно важно в свете настоящего обзора, оче-

видной практической направленностью исследований. За последние пятнадцать лет интенсивное развитие экспериментальных методов обеспечило как качественный, так и количественный прогресс в синтезе органических соединений. В первую очередь качественный рост выражается в том, что в настоящее время при условии наличия необхо-

* Обзорная статья