

Численное исследование и прогнозирование иммуностимулирующей активности биомолекул природного происхождения

Большинство органических соединений природного происхождения обладает широким спектром биологических эффектов, что делает их привлекательными кандидатами на роль новых лекарственных субстанций. Однако низкая специфичность взаимодействия молекул-кандидатов с компонентами метаболических путей приводит к слабой воспроизводимости ожидаемых эффектов и высокой вероятности проявления побочных. В докладе обсуждается один из подходов к численному исследованию механизмов реализации биологической активности, основанный на построении иерархии моделей от молекулярного уровня (QM/MM, молекулярный докинг) до метаболических путей, описываемых системой кинетических уравнений.