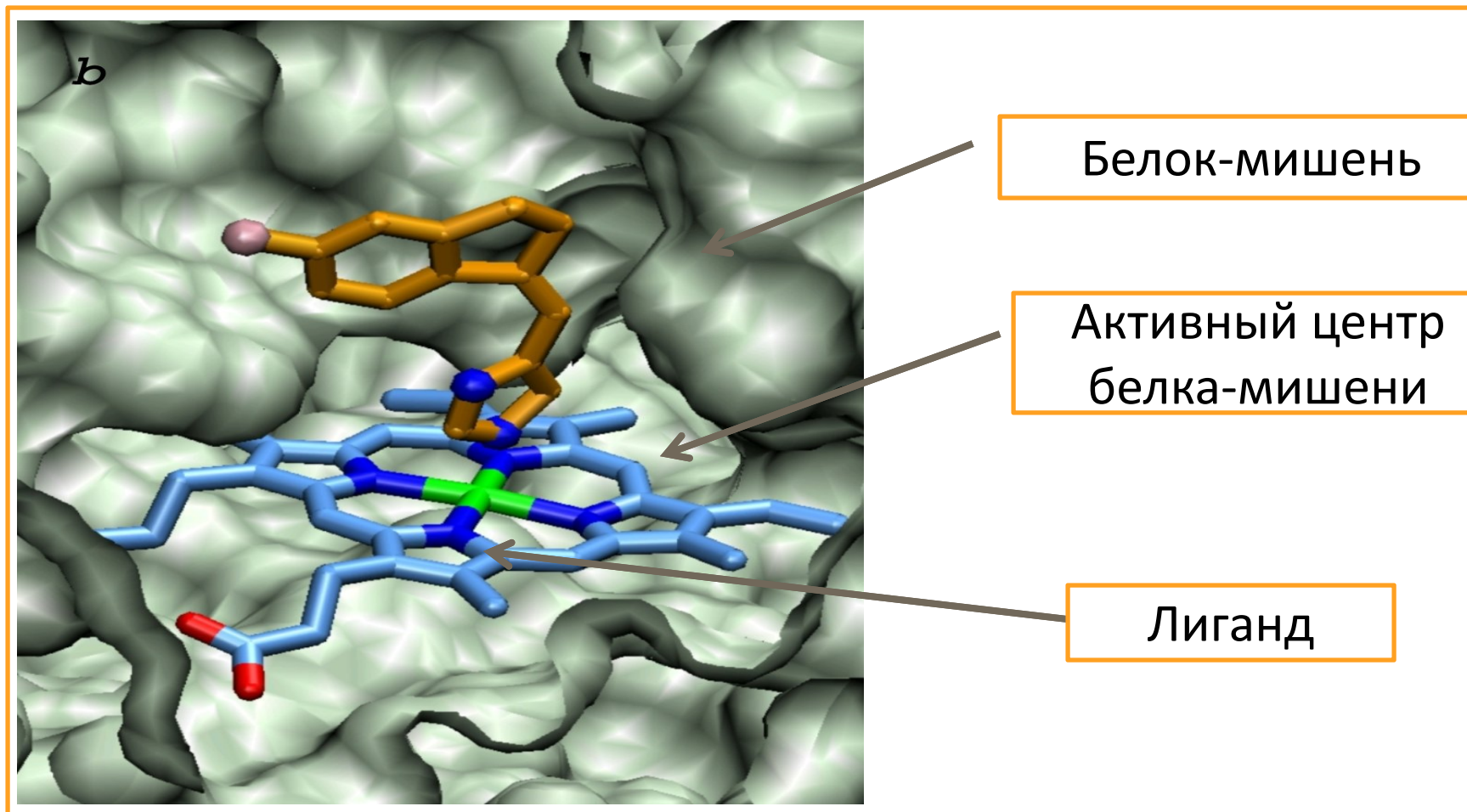


Использование компьютерного моделирования для разработки лекарственных препаратов

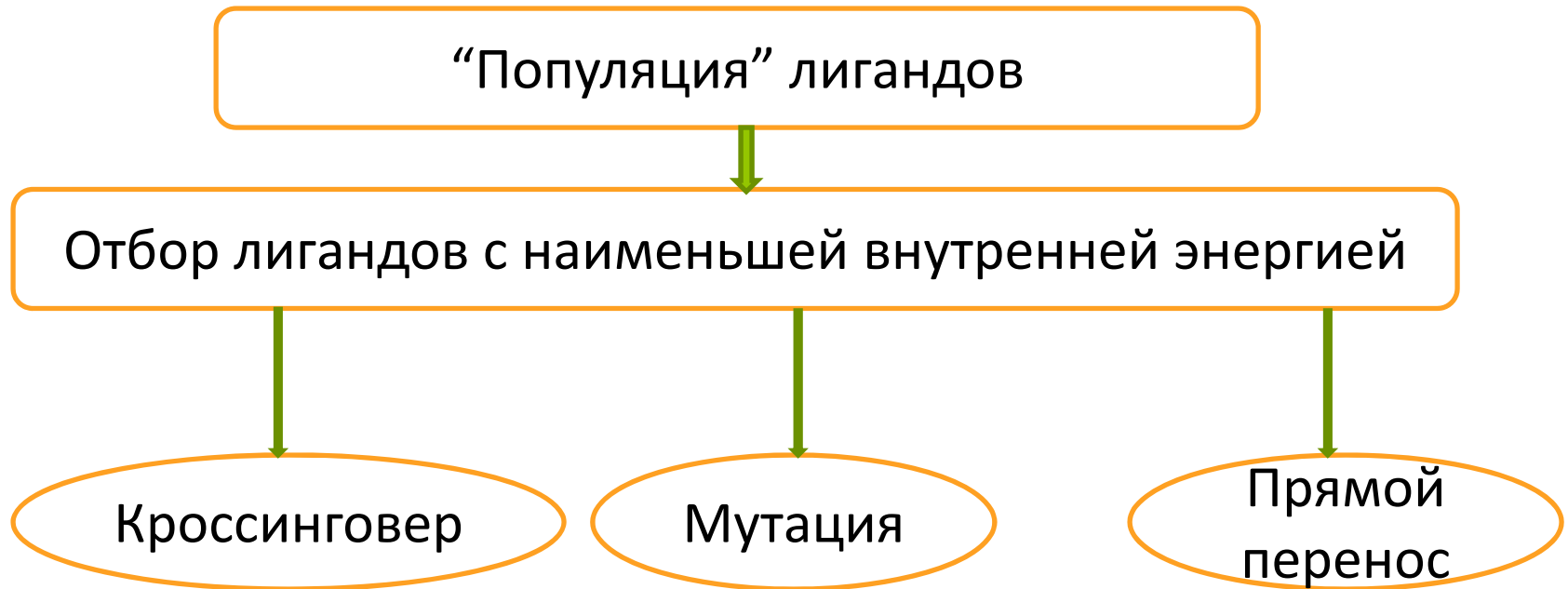
Докладчик: Богомолова А. П.

ДОКИНГ - поиск положения лиганда в активном центре белка-мишени, соответствующего наибольшему значению энергии связывания лиганда с белком.



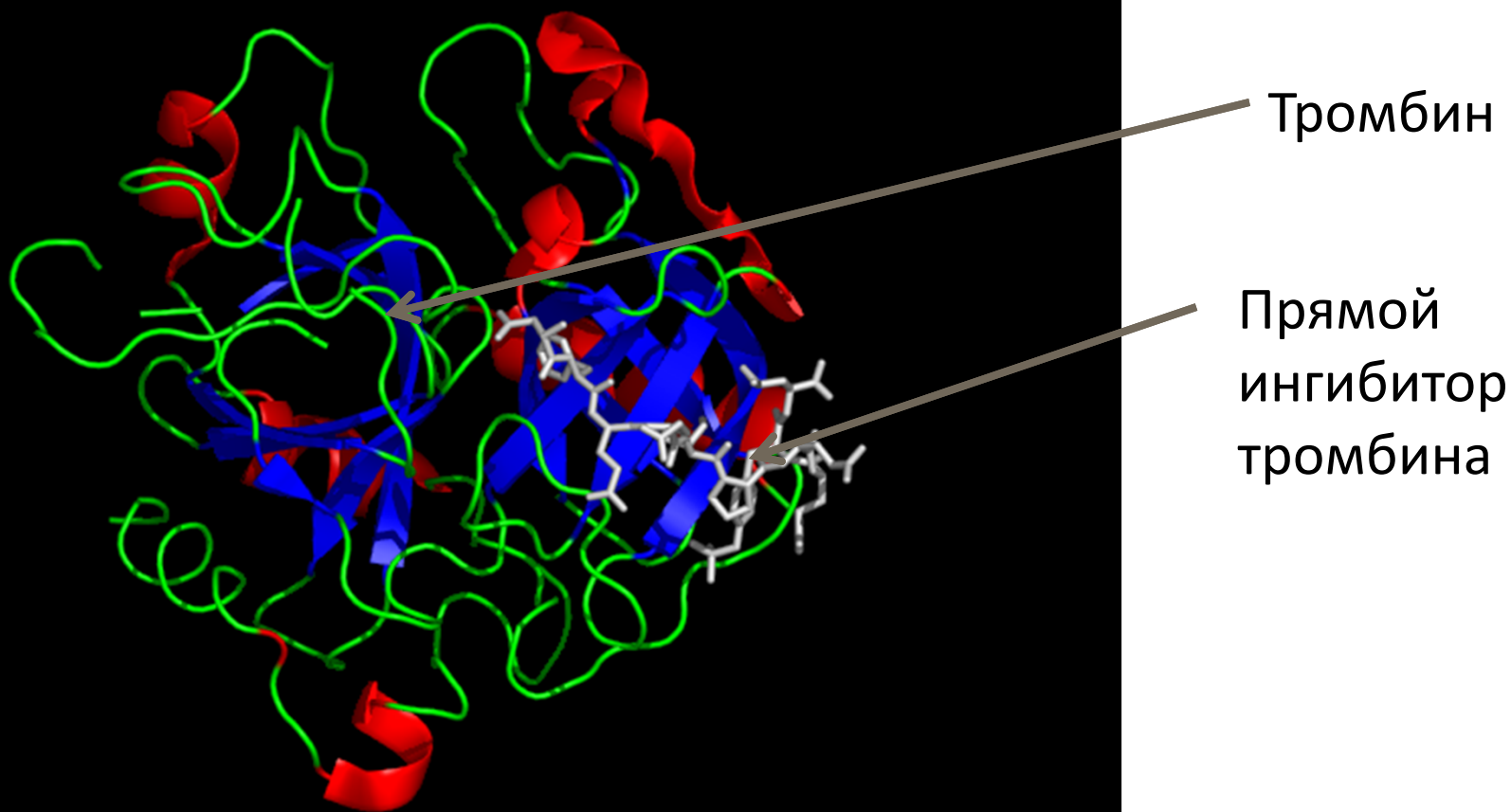
Генетический алгоритм

Цель: оптимизация положения лиганда



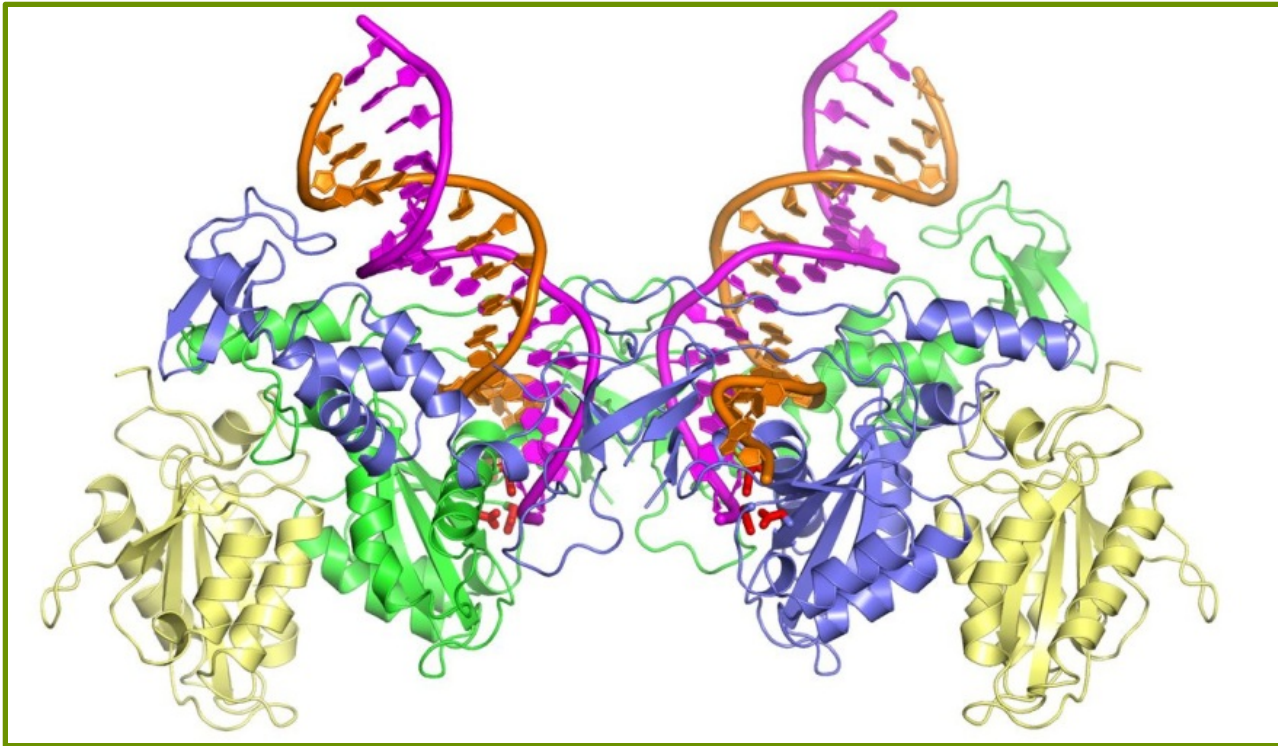
Тромбин: активирует превращение фибриногена в нерастворимый фибрин

Цель: найти прямой ингибитор тромбина



Интеграза ВИЧ-1

осуществляет встраивание вирусной к ДНК в ДНК зараженной
клетки



Были
разработаны
ингибиторы
интегразы ВИЧ