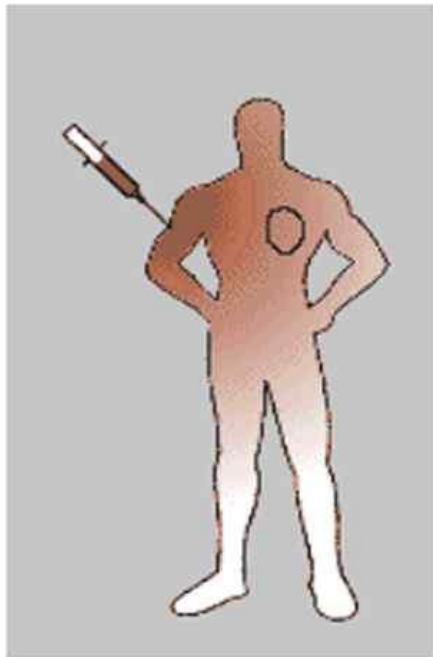




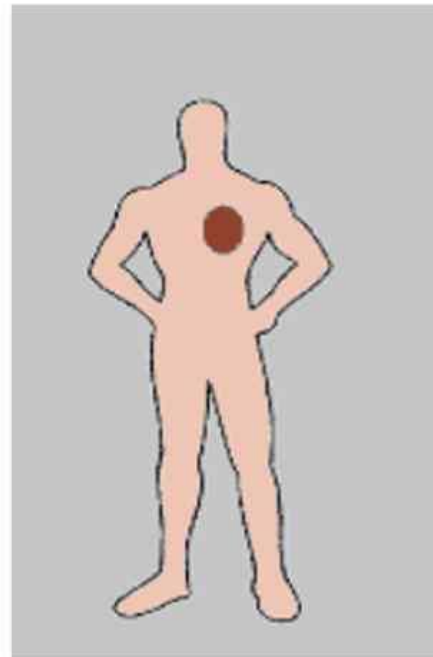
# Исследование ВОЗМОЖНЫХ взаимодействий хлорина Е6 и альбумина методами компьютерного моделирования.

- Автор: • Скобелкин Даниил
- Руководитель: • Кочергин Борис

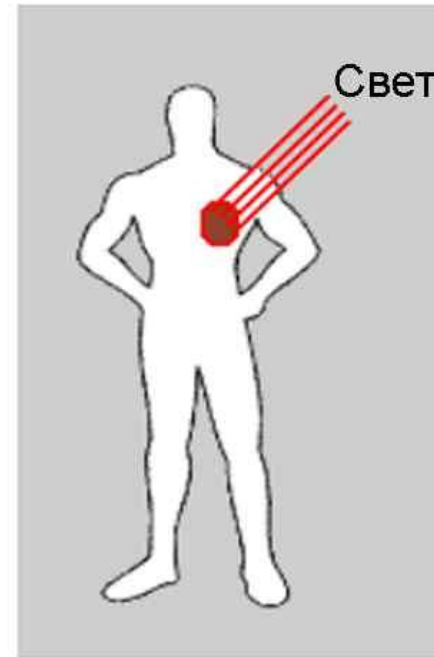
# Этапы фотодинамической терапии



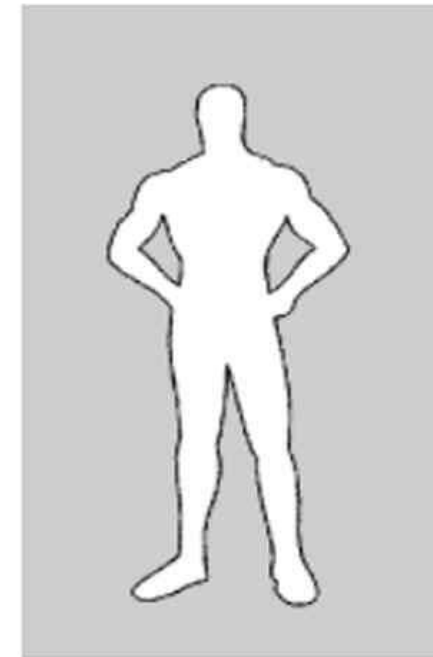
Введение фотосенсибилизатора



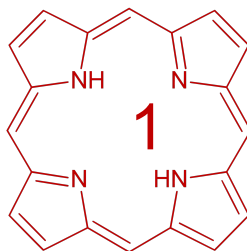
Накопление фотосенсибилизатора в опухоли



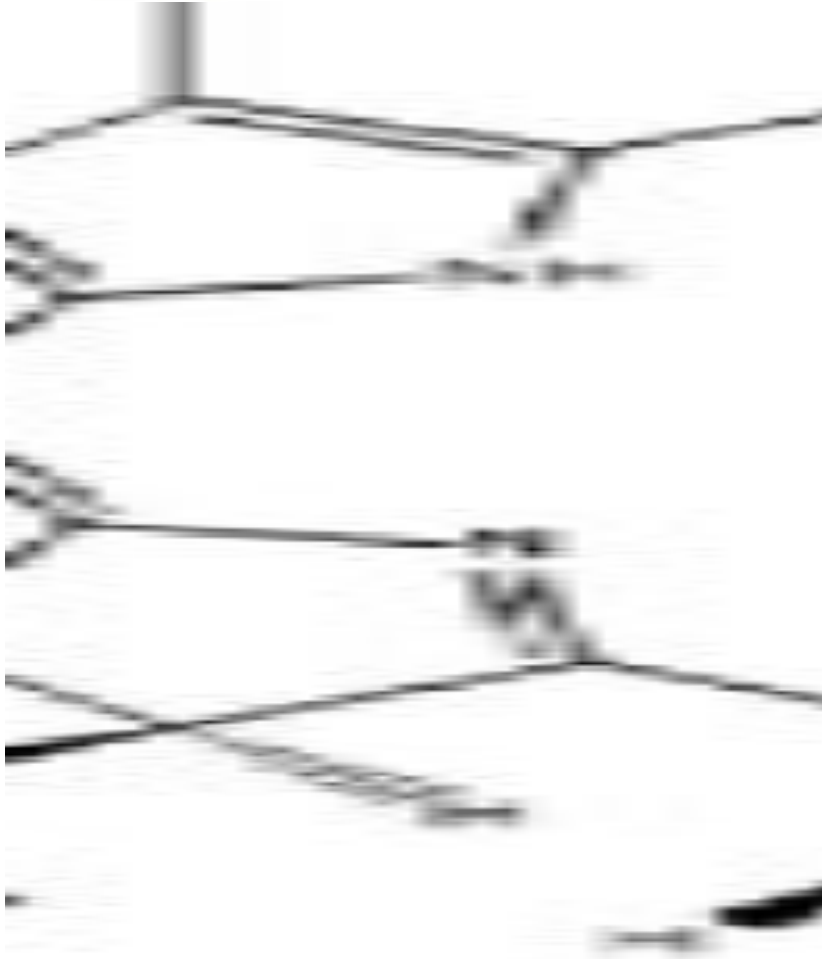
Облучение видимым светом



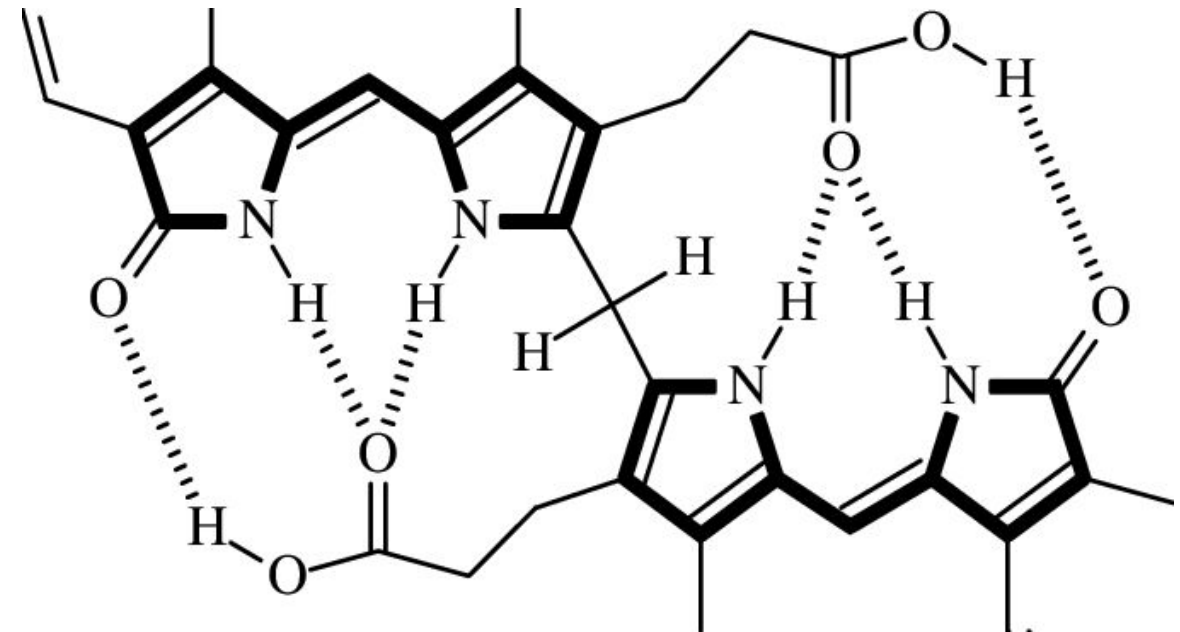
Селективное разрушение опухоли



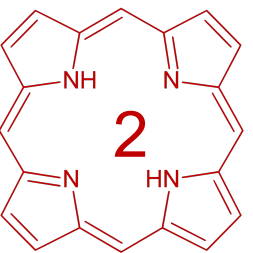
# Структурные формулы е6 и билирубина



Хлорид E6

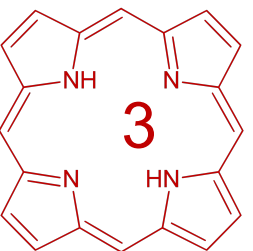


Билирубин

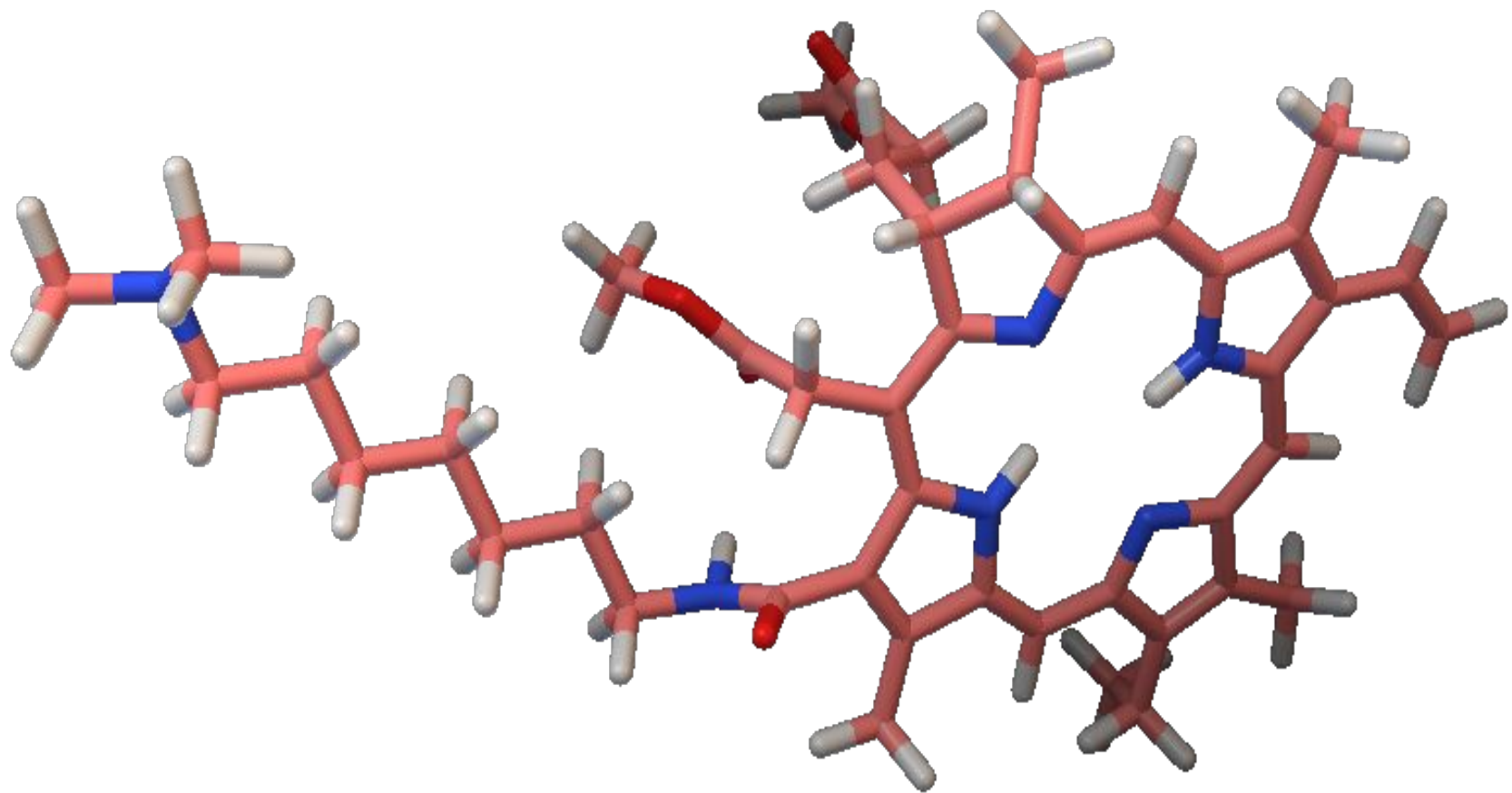


# Цель и задачи

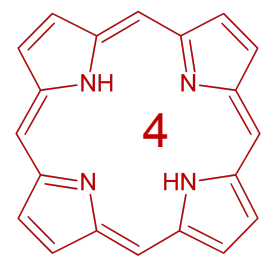
- Связано ли увеличение уровня билирубина с выработкой для подавления разрушения клеток или с замещением его хлорином E6 из комплекса с белком
- Методами квантовой химии построить молекулу хлорина
- Выяснить может ли хлорин проникать в карман альбумина
- Сравнить параметры взаимодействия с аналогичными для билирубина



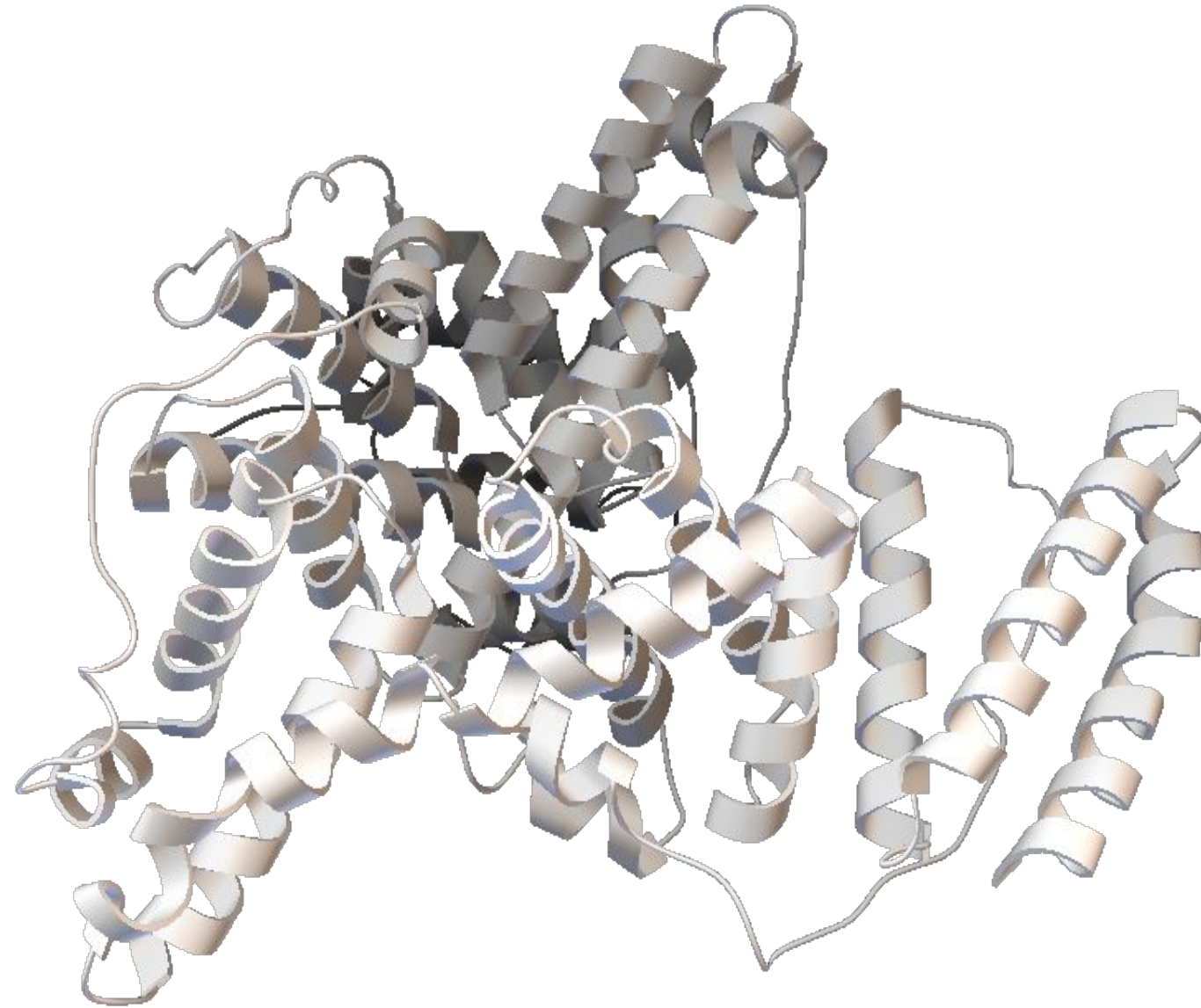
# Исследуемые молекулы



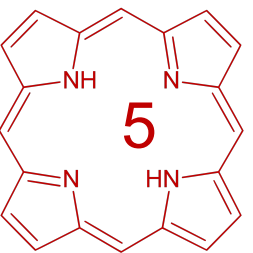
Хлорин РМЗ



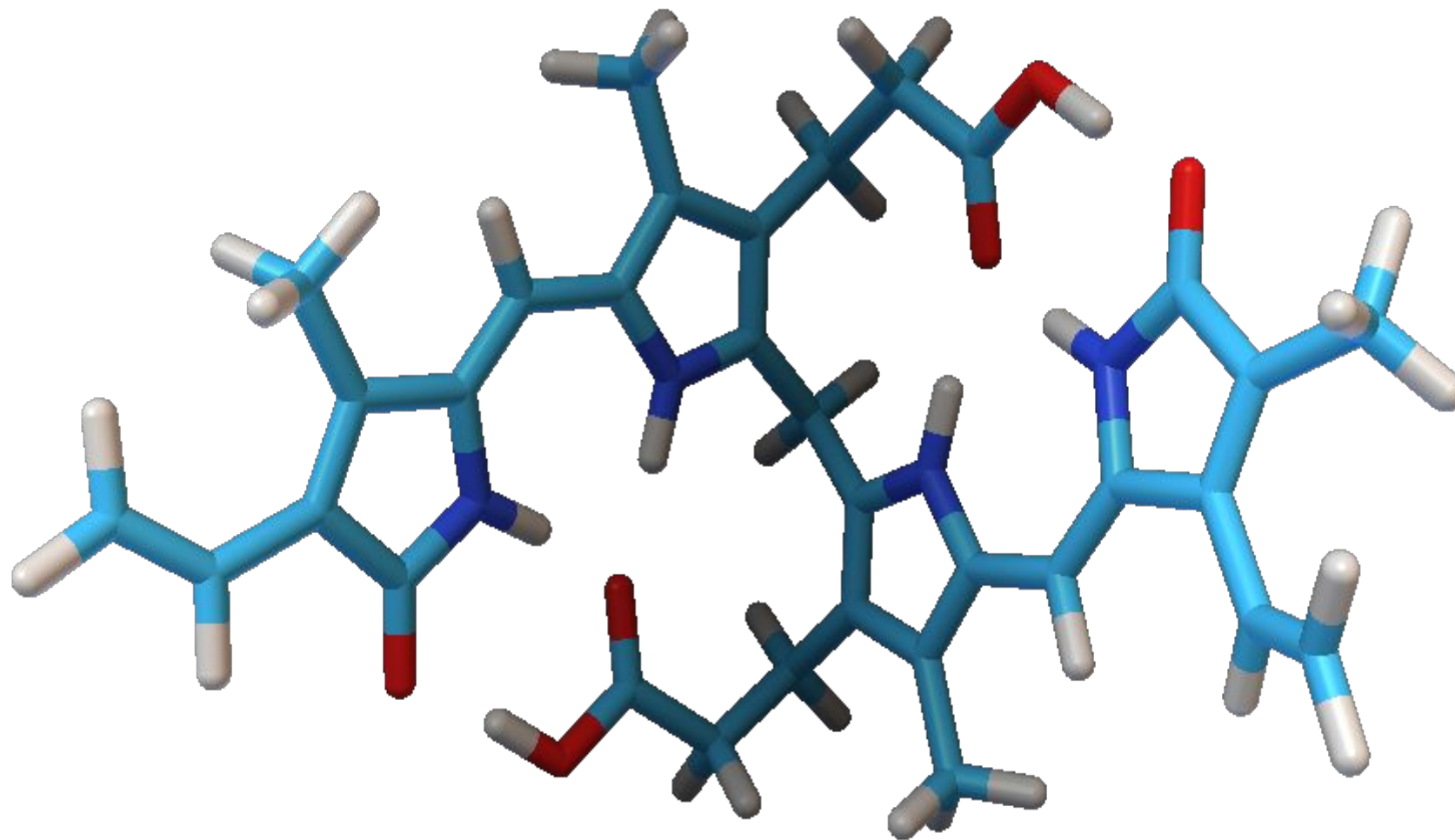
# Исследуемые молекулы



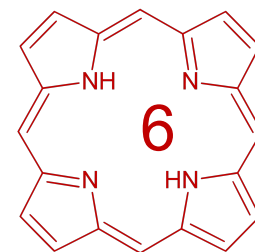
Альбумин



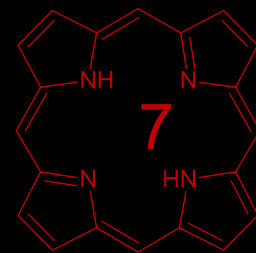
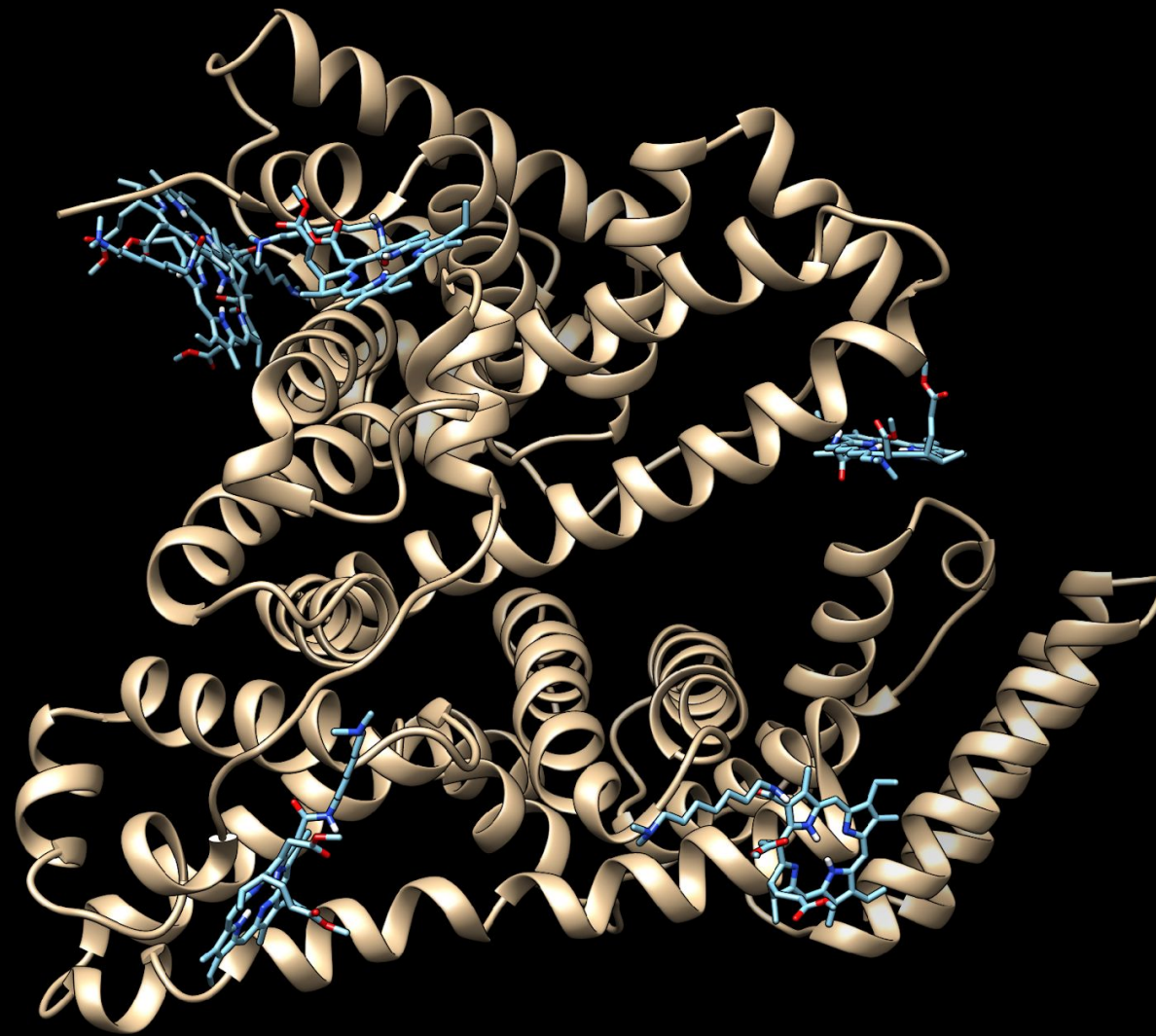
# Исследуемые молекулы



Билирубин

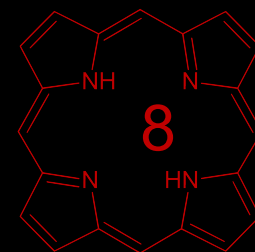


# «Слепой» белок



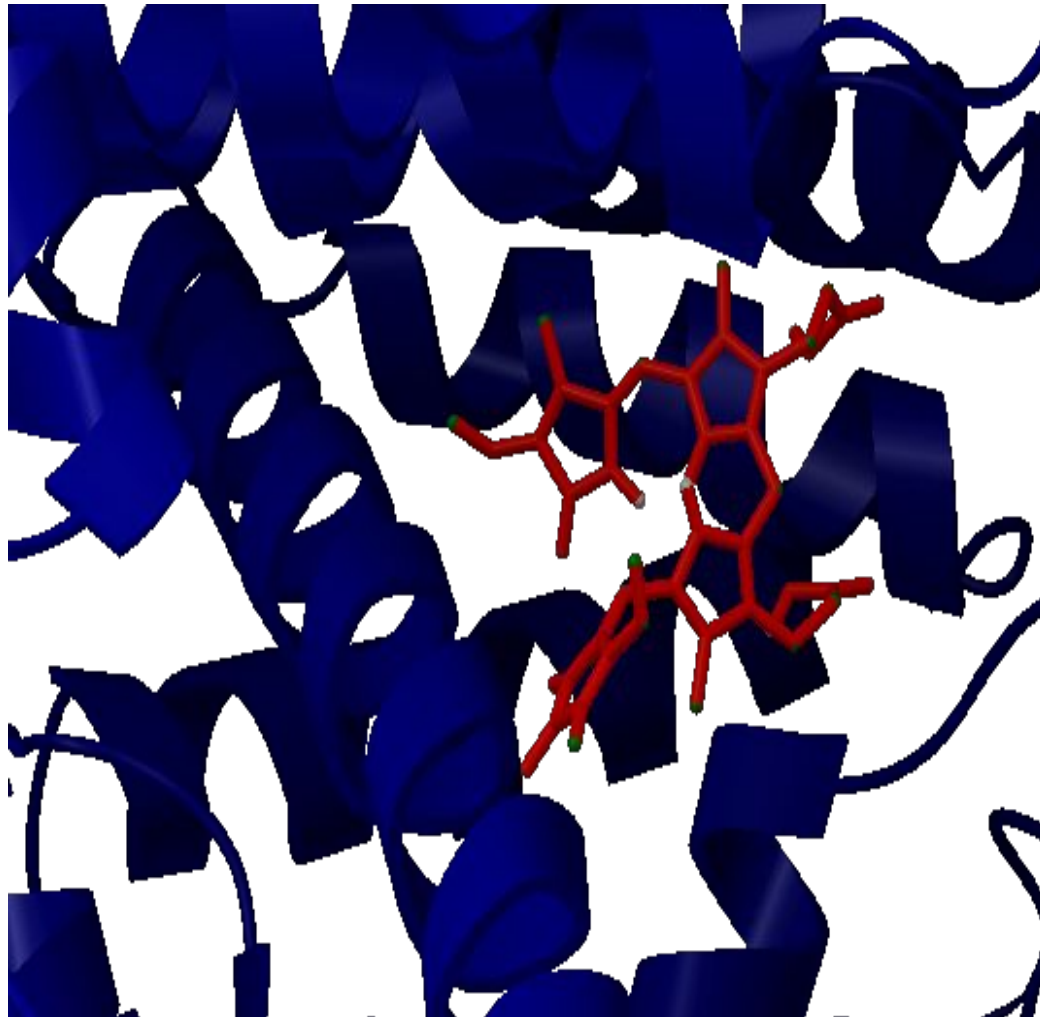


# Взаимодействие с карманом белка

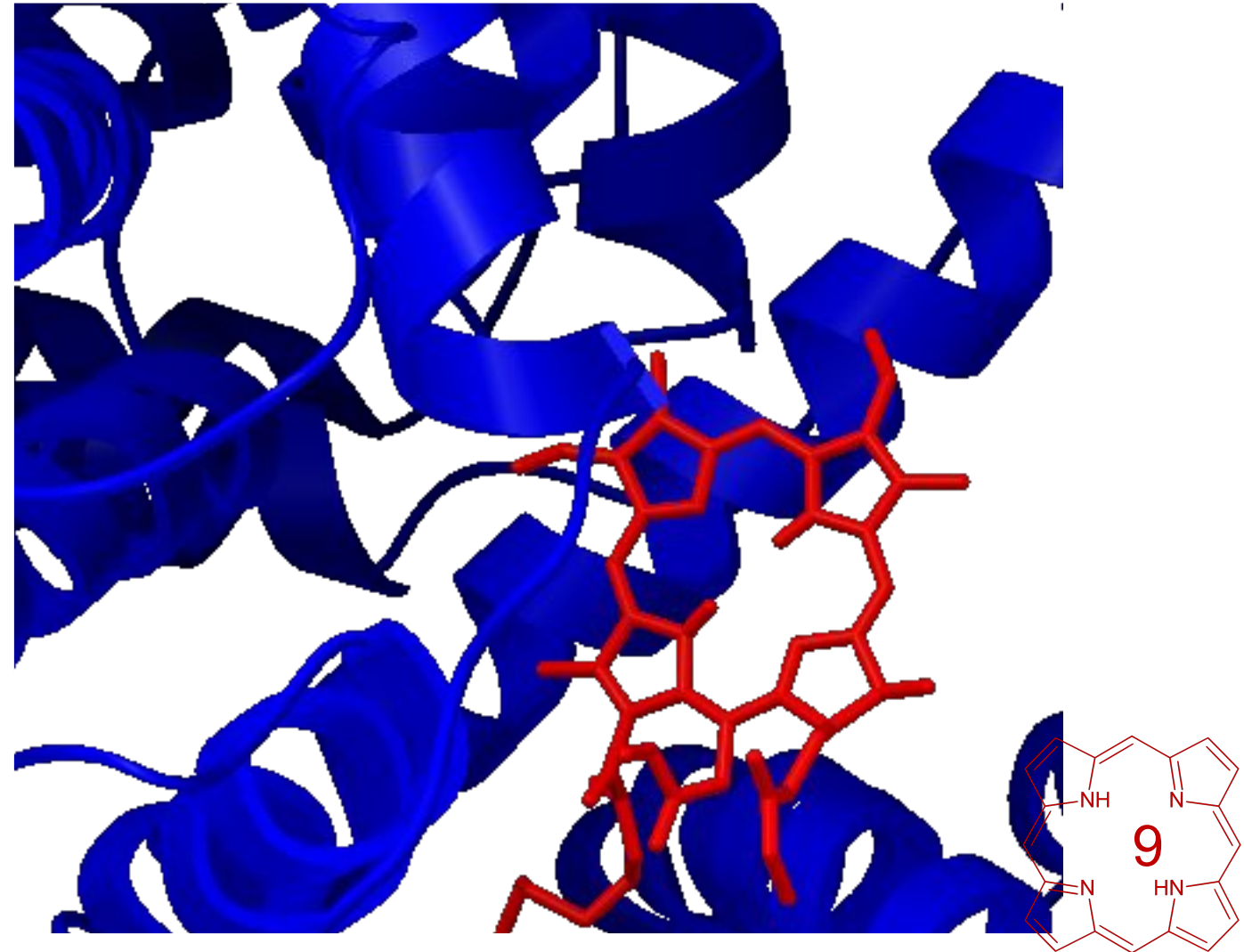


# Взаимодействие с карманом белка

Билирубин



Хлорин



# Вывод по проделанной работе

- Увеличение уровня билирубина в организме не связано с замещением его хлорином в комплексе с альбумином

