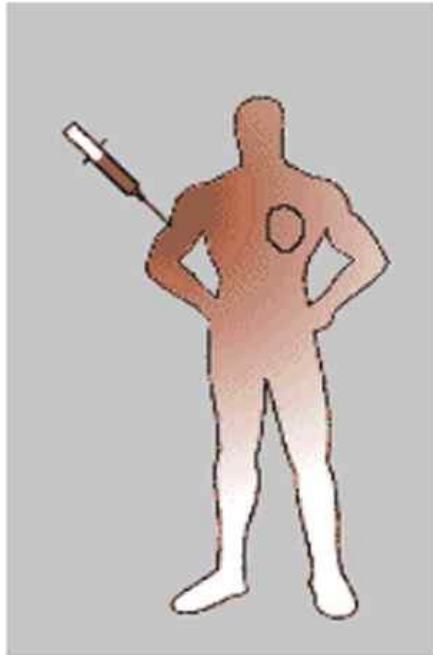




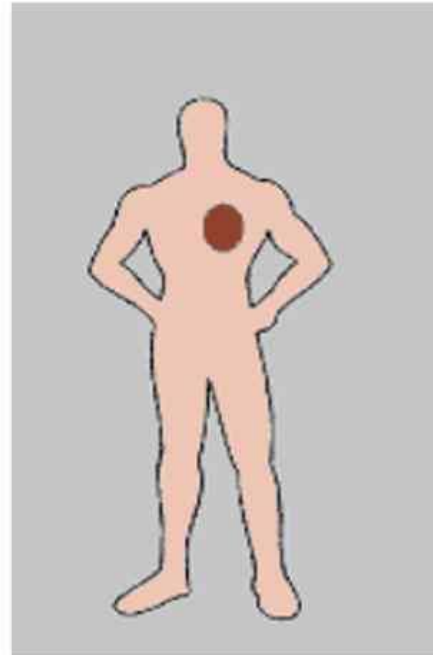
Исследование ВОЗМОЖНЫХ
взаимодействий хлорина
Е6 и альбумина методами
компьютерного
моделирования.

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

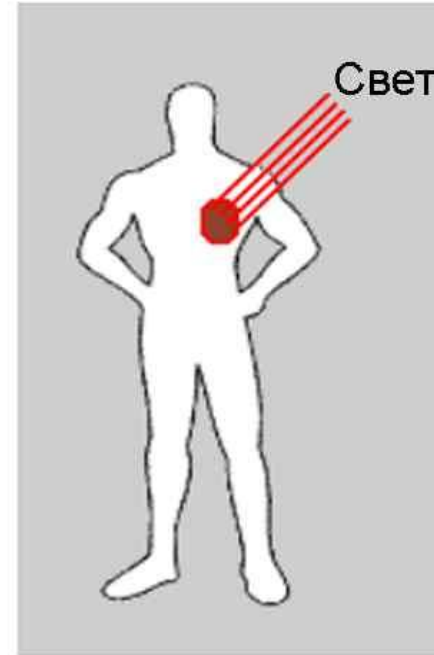
Этапы фотодинамической терапии



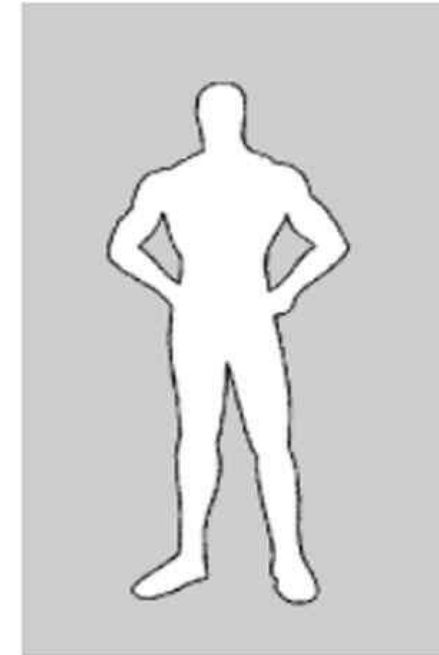
Введение фотосенсибилизатора



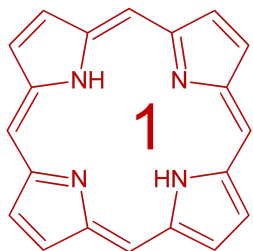
Накопление фотосенсибилизатора в опухоли



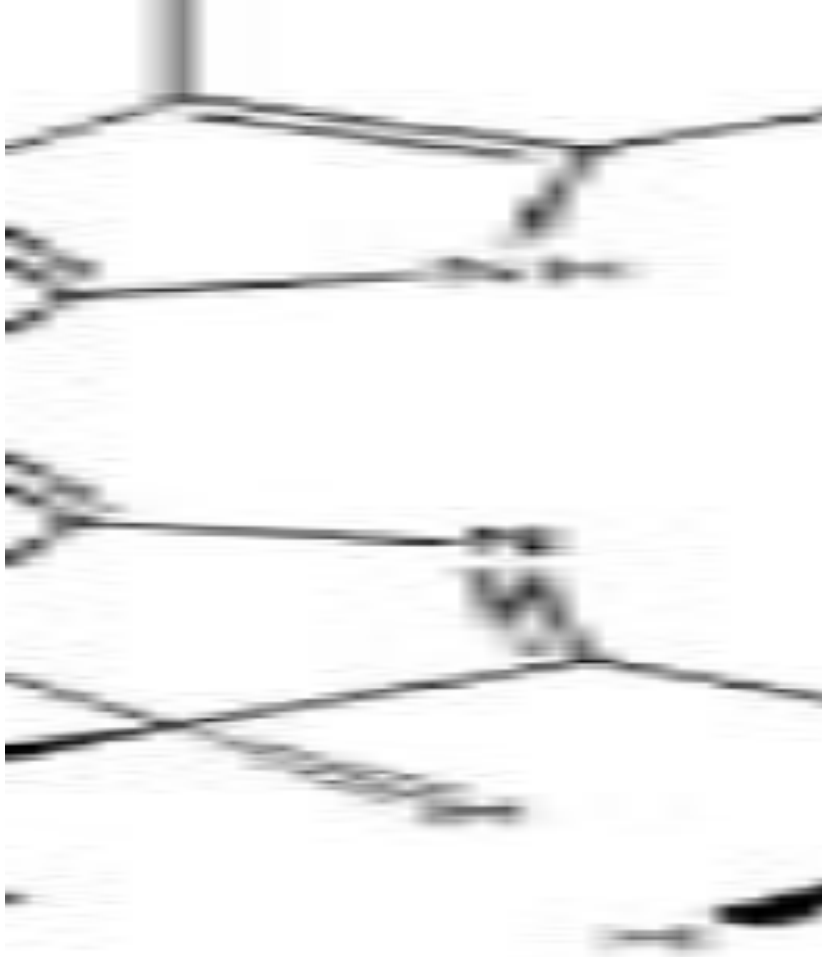
Облучение видимым светом



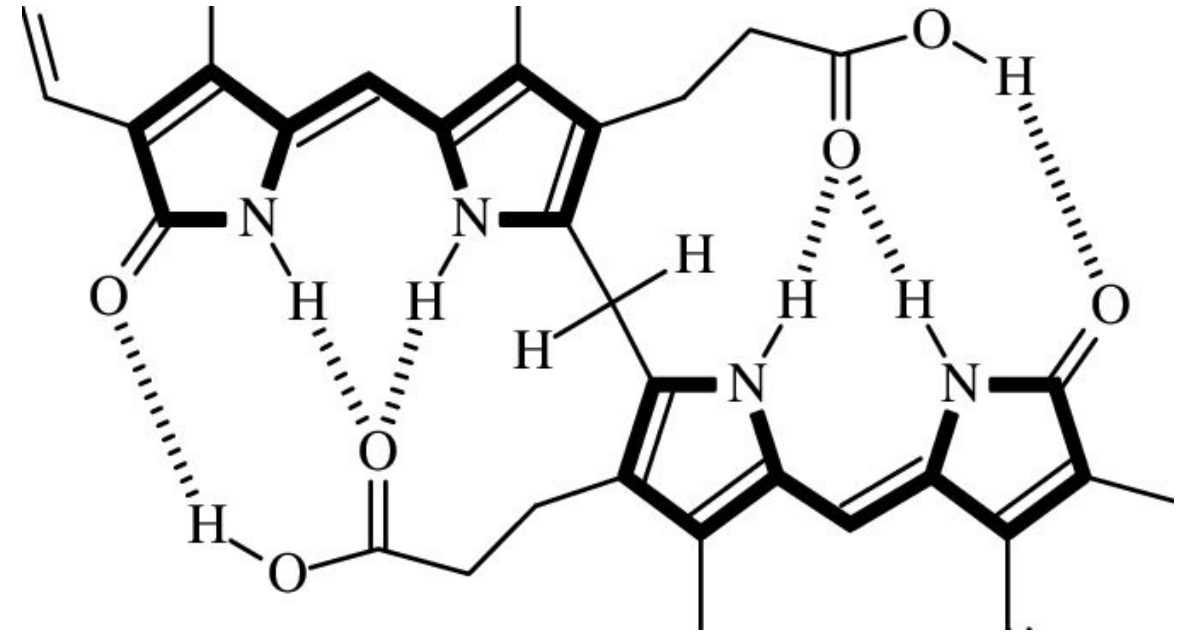
Селективное разрушение опухоли



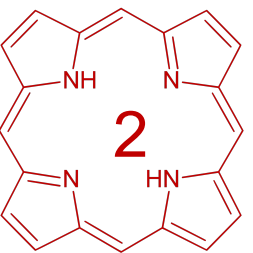
Структурные формулы е6 и билирубина



Хлорид E6

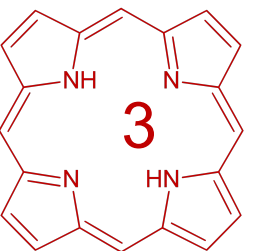


Билирубин

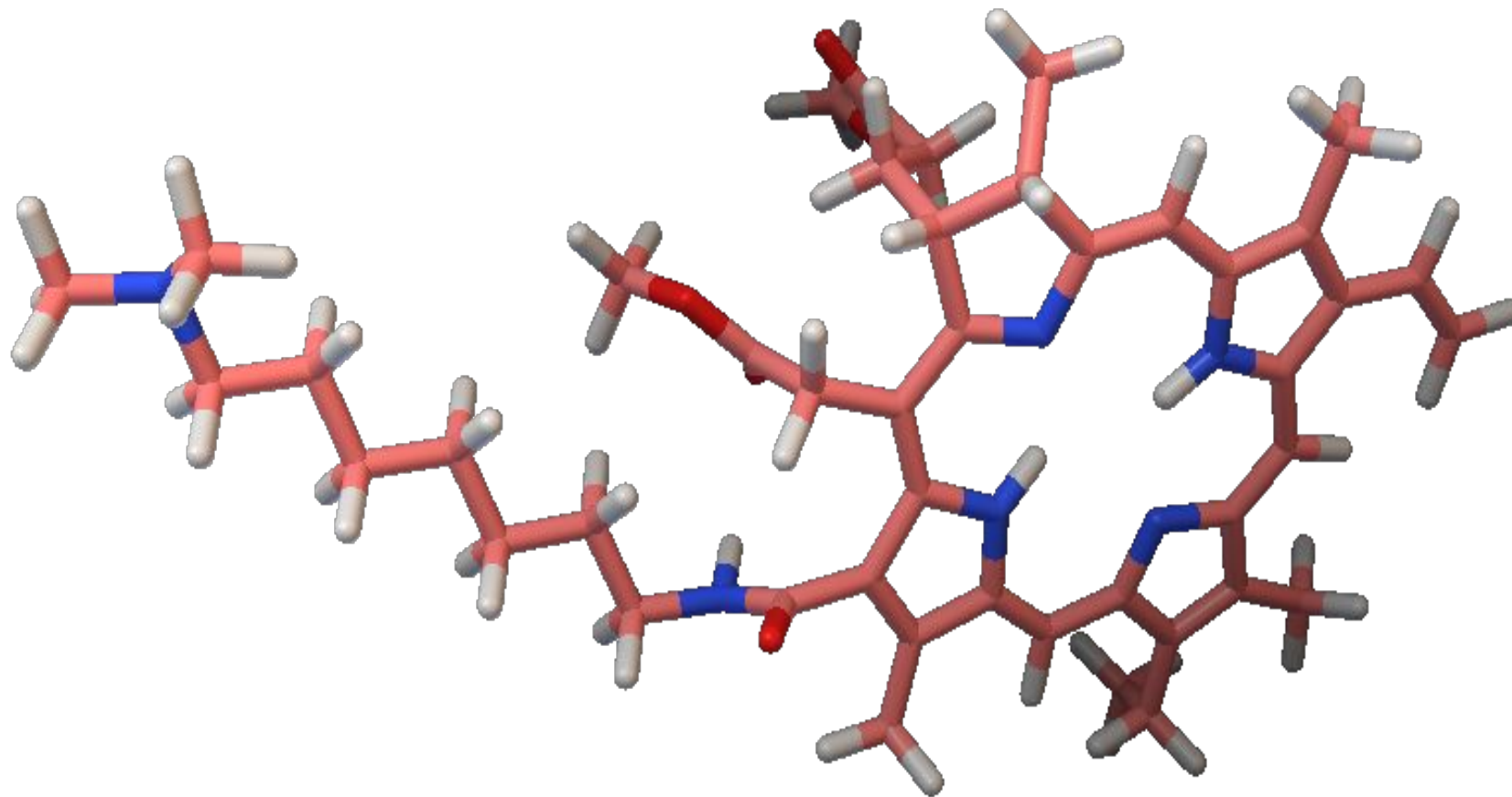


Цель и задачи

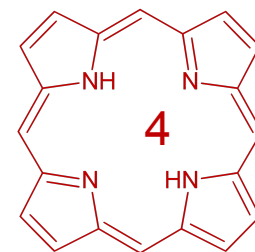
- Связано ли увеличение уровня билирубина с выработкой для подавления разрушения клеток или с замещением его хлорином E6 из комплекса с белком
- Методами квантовой химии построить молекулу хлорина
- Выяснить может ли хлорин проникать в карман альбумина
- Сравнить параметры взаимодействия с аналогичными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



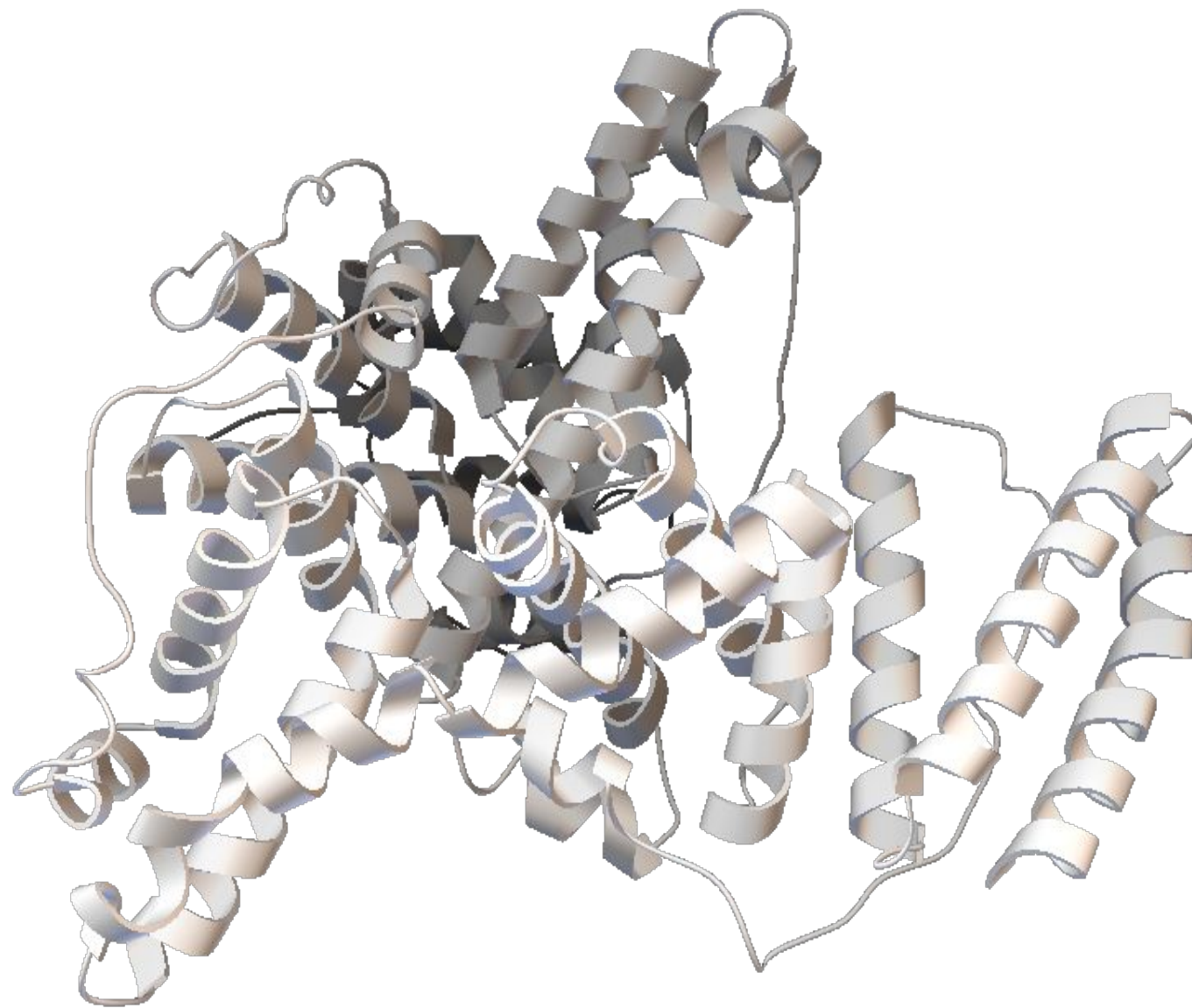
Исследуемые молекулы



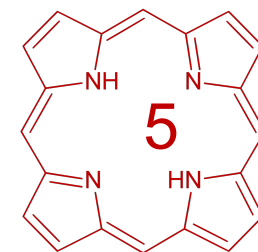
Хлорин РМЗ



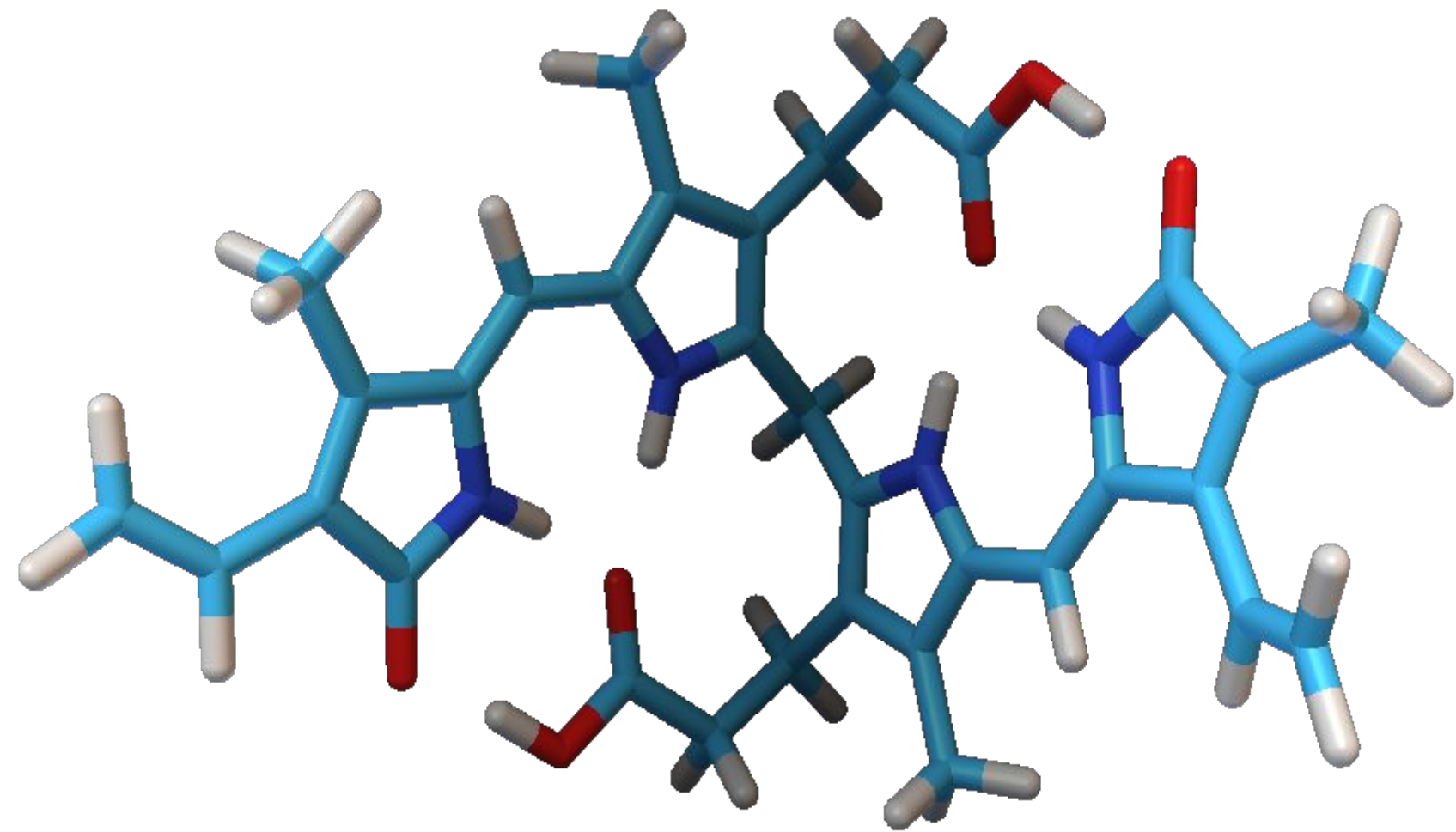
Исследуемые молекулы



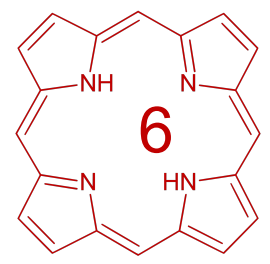
Альбумин



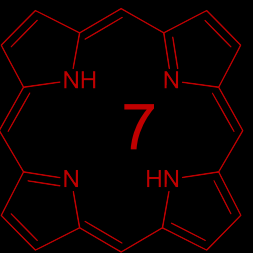
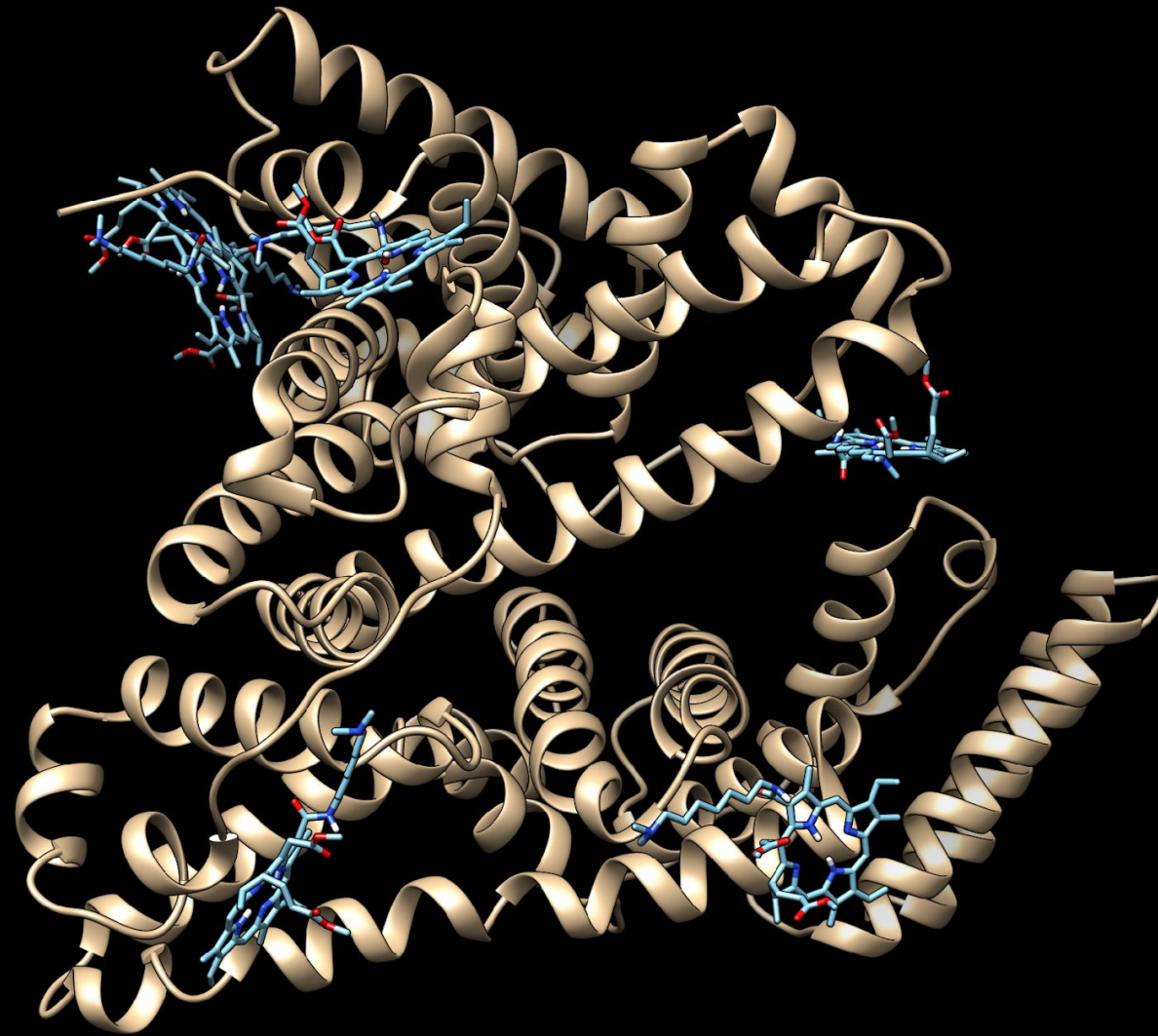
Исследуемые молекулы



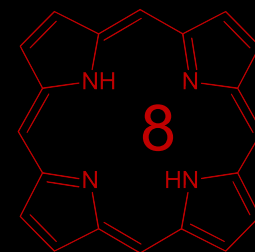
Билирубин



«Слепой» белок

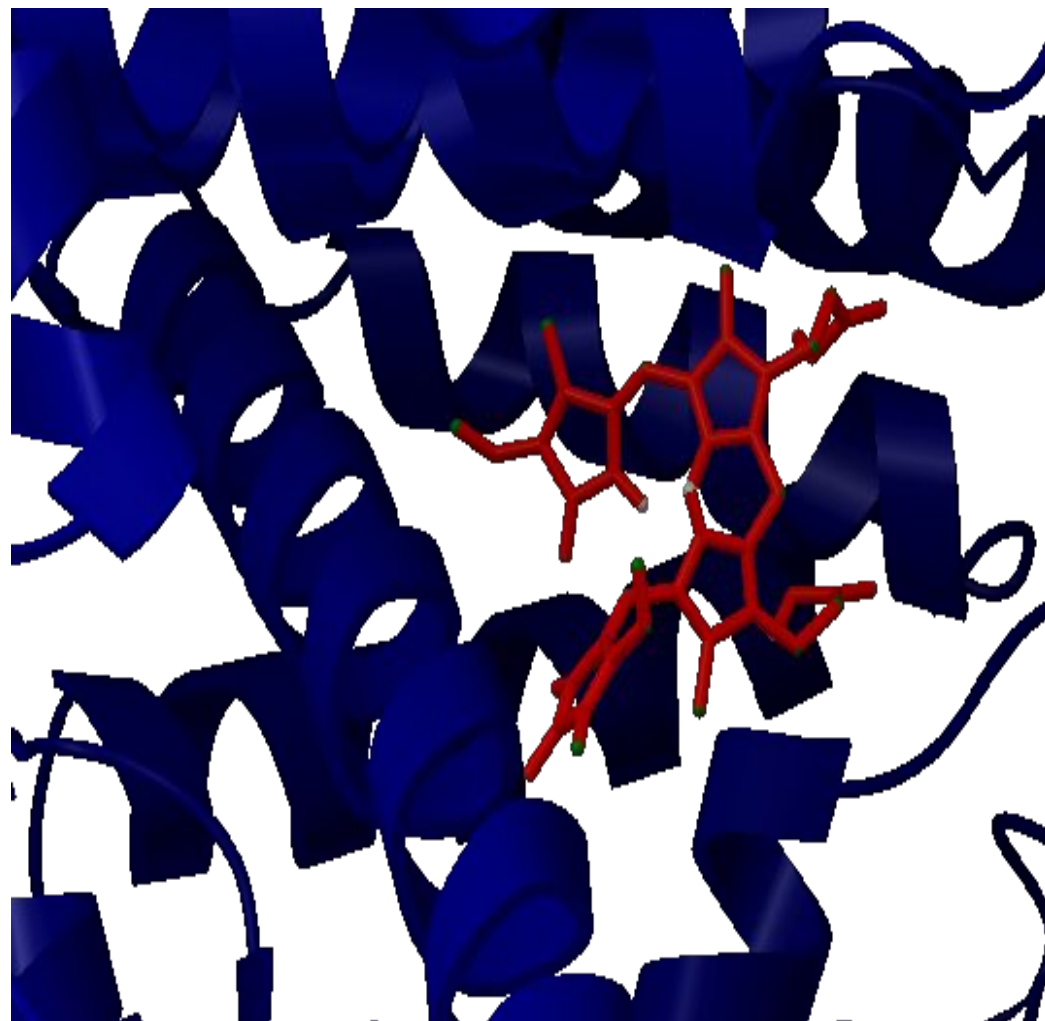


Взаимодействие с карманом белка

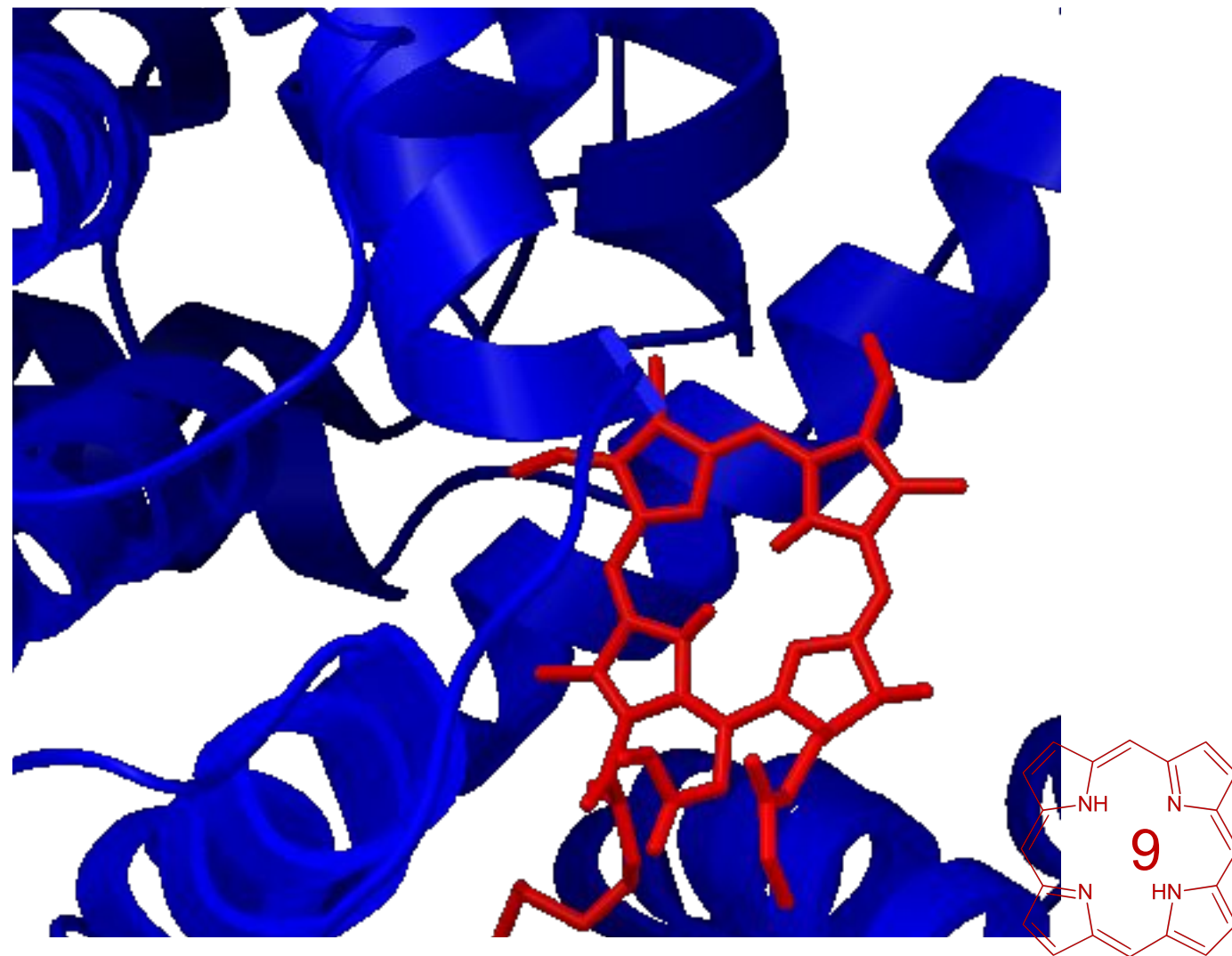


Взаимодействие с карманом белка

Билирубин



Хлорин



Вывод по проделанной работе

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

