ЛАБОРАТОРИЯ СТРУКТУРНОЙ БИОИНФОРМАТИКИ

**Цель:**

 Лаборатория занимается научными исследованиями в области биомоделирования и медико-биологических молекулярных систем.

**Научные задачи:**

1. Исследования физико-химических и фармакокинетических свойств соединений (ADME).
2. Оценка токсичности соединений in silico.
3. Поиск и идентификация сайтов связывания для лигандов и мишеней.
4. Виртуальный скрининг лигандов по фармакофору.
5. Конструирование и модификация биоактивных соединений с помощью хемоинформатики.
6. Предсказание и валидация молекулярных мишеней для исследуемых соединений.
7. Конформационный поиск оптимальных ориентаций лиганда (молекулярный докинг).
8. Моделирование взаимодействий системы лиганд-мишень (молекулярная динамика).
9. Предсказание селективности связывания лигандов с помощью анализа виртуальных взаимодействий.

**Научные интересы:**

1. Нейродегенеративные заболевания (болезнь Альцгеймера, Паркинсон).
2. Метаболические заболевания (сахарный диабет и антидиабетические агенты).
3. Разработка противосудорожных соединений.
4. Хемоинформатика противоопухолевых соединений.
5. Базы данных биоактивных соединений.