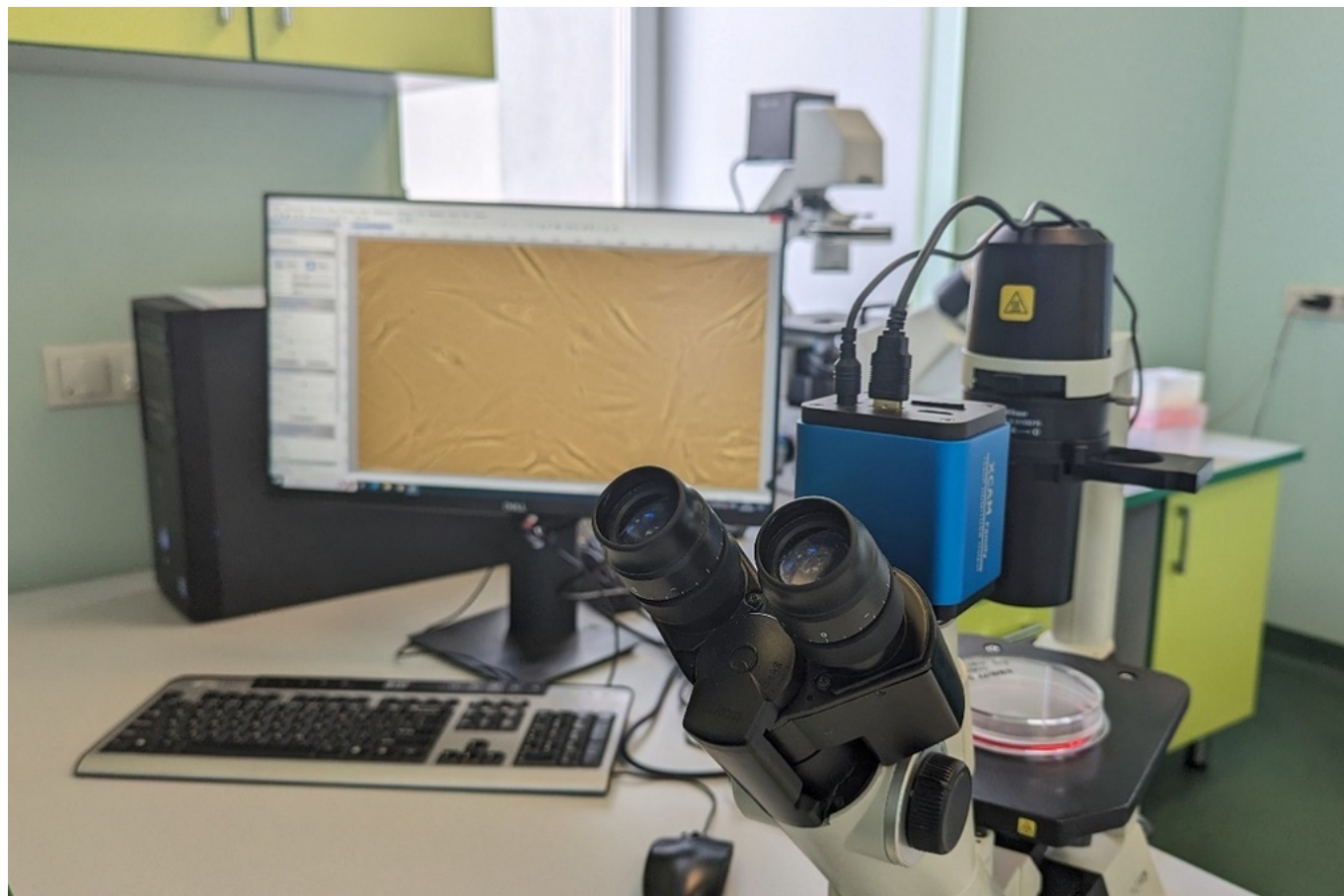


В Институте цитологии РАН предложили новый подход для более точного компьютерного моделирования лекарств

14.04.2026



Ученые Института цитологии РАН (ИНЦ РАН) протестировали несколько подходов по компьютерному моделированию лекарственных соединений и предложили модель, которая позволяет повысить точность предсказаний того, как потенциальные лекарственные соединения будут взаимодействовать с мембранами клеток пациента. Эксперименты проводились на флавоноидах — природных пигментах, которые придают цвет овощам и фруктам и в то же время являются антиоксидантами. Результаты исследования опубликованы в научном журнале [BioSystems](#).

Поиск и исследование новых лекарственных соединений — это длительный и дорогостоящий процесс, который требует большого числа команд разнопрофильных специалистов. При этом мало найти какое-либо новое эффективное действующее вещество: для того чтобы препарат попал на полки аптек, требуется череда лабораторных доклинических и клинических испытаний, а также отработка методов производства.

Сегодня для снижения стоимости поиска и внедрения новых лекарственных и фармакологических препаратов активно используются методы цифрового моделирования химических соединений, которые не требуют затрат на реагенты и наличие лабораторной

инфраструктуры. Однако для эффективного моделирования действия лекарств компьютерные алгоритмы должны быть максимально приближены к реальным экспериментам.

В русле данного исследовательского направления команда ученых Института цитологии ведет тестирование цифровых инструментов для изучения того, как малые молекулы потенциальных лекарственных соединений взаимодействуют с клеточной мембраной и изменяют её физико-химические свойства (например, электростатический потенциал, плотность упаковки и эластичность). Это критически важно для понимания фармакокинетики, биодоступности и механизмов действия лекарств на клеточном уровне.

«Мы разработали надежный фреймворк для более точного предсказания того, как новые лекарственные соединения будут взаимодействовать с мембранами клеток. Моделирование помогает понять, как молекулы меняют жесткость или электростатику мембран, что может лежать в основе их антиоксидантного или противоопухолевого действия. Выбранный подход позволяет повысить точность компьютерного моделирования, а также отсеивать неэффективные или токсичные соединения на ранних этапах исследования, сокращая количество дорогостоящих лабораторных тестов», – отмечает научный сотрудник Лаборатории моделирования мембран и ионных каналов ИИЦ РАН **Анна Малыгина**.

В качестве исследуемого вещества выступали три соединения класса флавоноидов (байкалеин, хризин и лютеолин) — это обширная группа природных растительных пигментов, которые придают овощам, фруктам, ягодам и цветам яркие цвета (красный, синий, желтый). Они являются мощными антиоксидантами, защищающими клетки человека от старения и повреждений, а также укрепляют сосуды, регулируют иммунитет и уменьшают воспаления. Эти соединения были выбраны в качестве модельных, поскольку уже много лет ученые Лаборатории моделирования мембран и ионных каналов ИИЦ РАН изучают их полезные свойства.

Сначала в рамках исследования были получены параметры молекул флавоноидов, используя специальный цифровой инструмент (CGenFF). Затем те из них, что были назначены «по аналогии», оптимизировали вручную через специальный плагин (ffTK), используя высокоточные квантово-химические расчеты для уточнения зарядов атомов, длин связей, углов и диэдральных углов соединения.

Затем ученые сравнили расчетные дипольные моменты и ИК-спектры оптимизированных молекул с эталонными квантово-химическими данными, подтвердив улучшение точности. После этого они смоделировали взаимодействие флавоноидов в различных концентрациях с мембранами, используя как стандартные, так и оптимизированные наборы параметров.

«Результаты моделирования мы сравнили с реальными экспериментами в лаборатории: при помощи метода дифференциальной сканирующей микрокалориметрии измерили влияние флавоноидов на фазовые переходы липидов клеточной мембраны и их упаковку. Сравнение результатов моделирования при помощи нашего фреймворка и лабораторных экспериментов с реальными соединениями показало высокую степень достоверности компьютерной симуляции», – добавляет **Анна Малыгина**.

Исследования поддержаны грантом РФ (№ [25-14-00162](#)) «Разработка подходов к преодолению резистентности к антибиотикам „последней надежды“, обладающих мембраноассоциированным механизмом действия».