

Расширенные услуги по анализу природных соединений и вычислительной химии

1. Подготовка растительного сырья

- Очистка, сушка, вакуумная сушка, дробление, измельчение

2. Количественный и качественный анализ растительного сырья

- Определение подлинности растения: влажность, зольность, экстрактивные вещества
- Минеральный состав: макро и микроэлементы
- Количественное определение флавоноидов, алкалоидов, кумаринов, дубильных веществ, свободных органических кислот, сапонинов, полисахаридов, витамина С

3. Получение растительных экстрактов

- Ультразвуковая экстракция
- Мацерация
- Фракционирование растворителями разной полярности

4. Определение содержания органических соединений в растительных экстрактах

- Газовая хроматография – масс спектрометрия (ГХ-МС)
- Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ)
- Тонкослойная хроматография (ТСХ)
- Подробный хроматографический профиль экстрактов и выделенных соединений
- Сравнение со стандартами, полное описание пиков

5. Ингибирование ферментов и кинетический анализ

- Расчёт IC_{50} для оценки активности
- Ферменты: гликозиды (антидиабетические) и другие по запросу
- Полный набор ферментативной кинетики с определением механизма ингибирования
- Исследование медленно связывающихся ингибиторов
- Детализированный профиль ферментативной активности

6. Связывание и аффинитет методом флуоресцентного тушения

- Расширенный анализ аффинитета ферментов с биологически активными соединениями
- Эксперименты по флуоресцентному тушению для определения силы и специфичности взаимодействия
- Количественная интерпретация констант связывания

7. Профилирование антиоксидантной активности

- Комплексные антиоксидантные тесты: DPPH, ORAC, FRAP, TBARS, ABTS
- Определение содержания фенолов и полифенолов

- Оценка природных и синтетических соединений
- Сравнительные графики активности и визуальные итоговые материалы

8. Молекулярный докинг

- Глубокие докинг-исследования природных и синтетических веществ
- Полная картография лиганд–белок взаимодействий
- Анализ, готовый для публикации

9. Профилирование токсичности биоактивных соединений

- Расширенная *in silico* оценка токсичности
- Прогноз мутагенности, канцерогенности, гепатотоксичности, кардиотоксичности и других рисков
- Наглядные схемы и визуальные описания

10. ADMET-профиль

- Полная оценка абсорбции, распределения, метаболизма, выведения и токсичности
- Визуальное представление результатов для удобства анализа и отчётности

11. Сетевой фармакологический анализ

- Отбор соединений по правилу Липински, токсичности и биодоступности
- Определение мишеней соединений и заболеваний
- Взаимодействие белок–белок
- Анализ путей GO и KEGG
- Визуализация сетей в Cytoscape
- Полностью готовые разделы «Материалы и методы» и «Результаты» для публикации

12. Молекулярные сети на основе LC-MS

- Классическое и feature-based (основанное на особенностях) молекулярное нетворкинг-анализирование на платформе GNPS
- Высокоточное картирование и визуализация метаболитов

13. Написание научных статей и редактирование на английском

- Профессиональная подготовка статьи от результатов до публикации
- Высококачественное редактирование английского текста (грамматика, стиль, ясность)
- Форматирование согласно требованиям выбранного журнала