

AllyMind: предсказание амилоидной ловушки для патогенной полиглутаминовой экспансии НТТ

Автор: Валентин Лебедин, независимый исследователь, Беларусь

Дата: 2 июля 2026 г.

Аннотация: Модель когерентного каскада (СТПК) применена к N-концевому фрагменту хантингина (НТТ), содержащему патогенную полиглутаминовую экспансию (67Q). Аналитически определена точная терапевтическая мишень — энергия связывания, необходимая для противодействия агрегации и стабилизации нативной укладки. Результаты получены на стандартном ПК без использования суперкомпьютерного моделирования.

«Сокрытое принадлежит Господу Богу нашему, а открытое — нам и сынам нашим до века.» — Второзаконие 29:29

Белок: НТТ_mutant (N-концевой фрагмент, 356 остатков)

Мутация: polyQ-экспансия (67 глутаминов, домен 18–84)

Параметр	Значение
Структурный контекст	Внутренне неупорядоченная область / амилоидогенное ядро
Рассчитанная стабильность мономера (дикий тип)	-44,500 эВ
Рассчитанная стабильность мономера (polyQ-мутант)	-41,530 эВ
Рассчитанная стабильность агрегата (димер polyQ)	-84,860 эВ
Предсказанная амилоидная ловушка	Да
Терапевтический порог	0,1250 эВ

Примечание: Терапевтический порог указывает энергию связывания, необходимую для восстановления нативной укладки и предотвращения агрегации. Значения абсолютны и могут быть использованы для скрининга малых молекул или разработки шаперонной терапии.