



ANSÄTZE DES MOLEKULAREN DOCKINGS IM GEBIET DES WIRKSTOFFDESIGNS

WS

INHALT

- Einleitung
- Definition
- Relevanz
- Herausforderungen



EINLEITUNG

- Arzneistoffe spielen eine wichtige Rolle
- Schwer zu synthetisieren
- Computersimulationen -> Leistungsfähige Werkzeuge



DEFINITION

- Verfahren, dass die bevorzugte Orientierung eines Moleküls bezüglich eines anderen vorhersagt
- Ziel: geometrische Anordnungen finden um ideale Bindungsaffinität zu erreichen
- Sampling
- Scoring-function



SAMPLING

- Unterschiedlicher Konformationen



SCORING

- Force-field-basiert
- Empirische
- Knowledge-basiert

