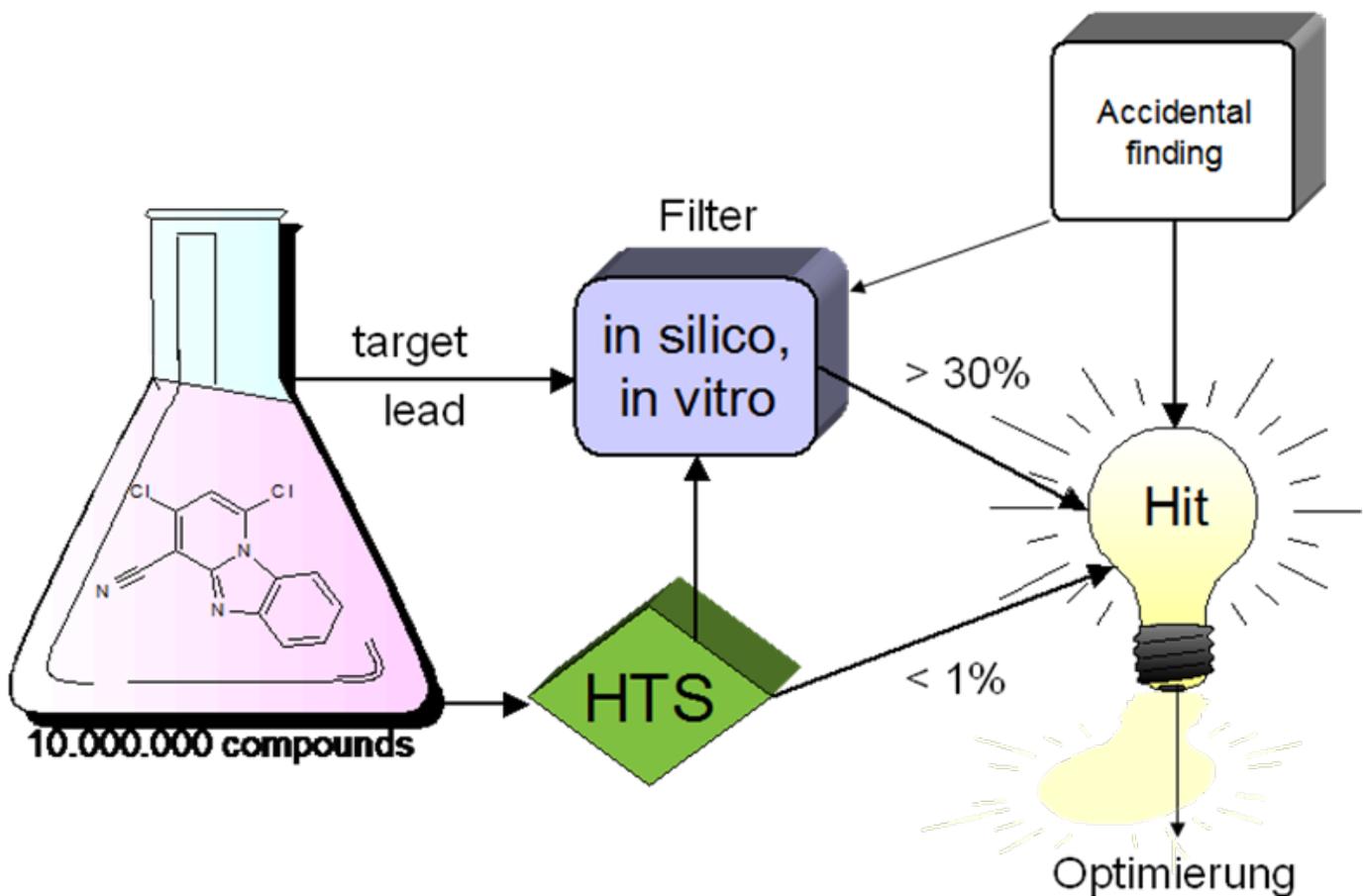


Structural Bioinformatics

Dr. Robert Preissner
Charité Berlin

In silico, in vitro, HTS, ...



Zunächst wird ein kurzer Überblick gegeben, welche Informationen über Proteine und Liganden auf atomarer Ebene verfügbar sind. Verschiedene Varianten der Suche nach Liganden (in silico Screening) werden verglichen und mit Beispielen belegt. Physiko-chemische Substanzeigenschaften, die für die Anwendung der Substanzen am Menschen wichtig sind werden beleuchtet. Multiple Drug-Target Beziehungen im Kontext der Stoffwechsel- und Signalwege sind ein ebenso wichtiges Mittel der Substanzauswahl und Bewertung. Wenn Zeit bleibt, erzähle ich noch etwas über Fragment-basierte Medikamentenentwicklung und Drug-Repotioning.