

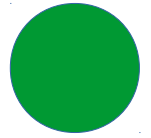
Vorhersage der Struktur und Platzierung der funktionellen Seitenkette eines Proteins und ihre partielle Hemmung.

An Exact Algorithm for Side-Chain Placement in Protein Design



- Mathematische Ansatz zur Berechnung der Seitenkettenplatzierung
 - Kombination aus zwei Algorithmen
 - 1) Branch and Bound:
SCP Problem wird in kleinere Probleme unterteilt und einzeln behandelt
 - 2) Lagrangian relaxation:
Approximieren eines schwierigeren Problems durch Anwendung auf ein kleineres Problem
- => Ansatz stellt keinen Bezug zu Prozessen im Organismus her

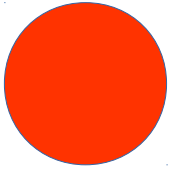
Molecular modelling



- Erhöhte Konzentration von dem Nerve growth factor(NGF) → Schmerzen
- Partielle Veränderung der Struktur des NGF mithilfe von Software(Sybyl-X 2.1.1)
- Silicio Docking

=> Strukturen müssten in mehreren Organismen getestet werden um Erfolg zu beweisen

Comparative Protein Structure Modeling Using MODELLER



- Vergleich von „unbekannten“ Protein Sequenzen mit bereits bekannten
- Faltungsmuster, Funktion

=> Sequenz ist nicht ausreichend um die 3D Struktur 100% vorherzusagen, dennoch sehr hilfreich für schnelle Informationen

