

Химическая модификация



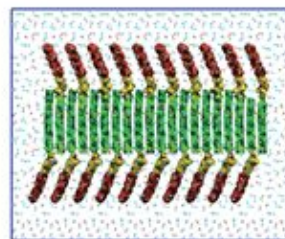
Молекула



Агрегаты



Предсказание укладки



в явном растворителе



в неявном
растворителе

Экспериментальные методы косвенные

Спектроскопия (ИК, КД, УФ-вид)
Дифракция (рентген/электроны/нейтроны)
Окрашивание красителем

прямая визуализация

Атомно-силовая микроскопия
Электронная микроскопия
крио-Эм

Моделирование в объеме



Моделирование на
подложке

Анализ