

İLAÇ ETKEN MADDESİ TASARIM YÖNTEMLERİ

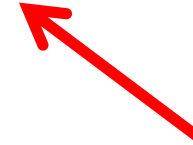
➤ EFEKTÖRE DAYALI İLAÇ TASARIMI

Efektörden hareket edilir

Efektörün yapısı bilinir

Ligantlar
İlaç Etken Maddeleri

KEMOİNFORMATİK



➤ HEDEFE DAYALI İLAÇ TASARIMI

Hedeften hareket edilir

Hedefin yapısı bilinir

Reseptör, Enzim ve Nükleik Asit

BİYOİNFORMATİK



➤ EFEKTÖRE DAYALI İLAÇ TASARIMI

- 1. Geleneksel (2D) QSAR, QSPR**
- 2. 3-D QSAR (CoMFA, CoMSIA)**
- 3. Farmakofor Analizi**



Kemoinformatik çalışmalar

➤ HEDEFE DAYALI İLAÇ TASARIMI

1. Doking Yöntemi

2. Fragmana Dayalı İlaç Tasarımı

MOLEKÜLER MODELLEME

MOLEKÜLER MODELLEME

Biyoinformatik çalışmalar