

## ElexoPharm - Hit-Identifizierung

### Hit-Identifizierung mit Hilfe eines virtuellen Screenings

Zur Identifizierung erster Hits werden Informationen entweder über das Targetprotein oder über eine aktive (natürliche) Verbindung oder einen endogenen Liganden benötigt. Ist die Proteinstruktur bekannt, werden mit Hilfe eines virtuellen Screenings von Substanzbibliotheken virtuelle Hits bestimmt. Diese werden dann gekauft (falls erhältlich) oder selbst synthetisiert und anschließend getestet.

Wenn die Struktur einer aktiven natürlichen Verbindung bekannt ist, wird ein Liganden-basierter Ansatz gewählt: Per Computer werden ähnliche Verbindungen gesucht, die dann auf sogenannte "drug like properties" (medikamentenähnliche Eigenschaften) untersucht werden.

Zumindest eine Struktur sollte bekannt sein:

- (A) : Das Targetprotein
- (B) : eine aktive (natürliche) Verbindung oder ein endogener Ligand

- (A) : virtuelles Screening von Substanzbibliotheken
- (B) : Computersuche nach ähnlichen Verbindungen

Die gefundenen Hits werden auf "drug like properties" untersucht.

