



Εργαστήριο Σχεδιασμού Φαρμάκων

Αναλυτικό Πρόγραμμα

14⁰⁰ - 17⁰⁰

Πέμπτη 6 Μαρτίου

Τίτλος: (α) Εισαγωγή στον Ορθολογικό Σχεδιασμό

(β) Βασικές έννοιες στη Μοριακή Μοντελοποίηση.

Συστήματα συντεταγμένων, Πεδία δυνάμεων, Επιφάνειες Δυναμικής ενέργειας (PES), Μέθοδοι Ελαχιστοποίησης της Ενέργειας. (Π. Ζουμπουλάκης)

Άσκηση: Σχεδιασμός μορίων στις 3Δ. Χρήση αλγορίθμων ελαχιστοποίησης της ενέργειας.

Πέμπτη 13 Μαρτίου

Τίτλος: Διαμορφωτική Ανάλυση Βιοδραστικών Μορίων (Π. Ζουμπουλάκης - Α. Πολίτη)

Άσκηση: Εφαρμογή αλγορίθμων Τυχαίας Δειγματοληψίας (Random Sampling) και Συστηματικής Αναζήτησης (Grid Scan) στη διαμορφωτική ανάλυση.

Προσομοίωση Μοριακών Συστημάτων με Μοριακή Δυναμική. Υπέρθωση Μορίων.

Πέμπτη 20 Μαρτίου

Τίτλος: NMR και Υπολογιστική Χημεία. Προσομοίωση 1D φασμάτων.

Χρήση φασματοσκοπίας NMR στη Διαμορφωτική Ανάλυση. (Π. Ζουμπουλάκης)

Άσκηση: Αποτίμηση φάσματος ¹H και προσομοίωσή του. Εφαρμογή περιοριστικών αποστάσεων από 2D NOESY στη διαμορφωτική ανάλυση.

Ξενάγηση στο Εργαστήριο Μοριακής Ανάλυσης (Χώρος NMR).

Πέμπτη 3 Απριλίου

Τίτλος: Λογισμικά ανίχνευσης ενεργών κέντρων σε υποδοχείς και λογισμικά Μοριακής Πρόσδεσης. Μελέτες συσχέτισης δομής-δράσης (QSAR) (Αικ. Κουκουλίτσα, Α. Πολίτη, Π. Ζουμπουλάκης)

Κουκουλίτσα, Α. Πολίτη, Π. Ζουμπουλάκης)

Άσκηση: Κατασκευή μοντέλου QSAR.

Πέμπτη 10 Απριλίου

Τίτλος: Μελέτη φαρμακοκινητικών ιδιοτήτων (ADME) και πρόβλεψη των θέσεων μεταβολισμού βιοδραστικών μορίων με χρήση κατάλληλων

λογισμικών (Αικ. Κουκουλίτσα)

Άσκηση: Παρουσίαση λογισμικού VolSurf, MetaSite

Πέμπτη 17 Απριλίου

Ενζυμική κινητική - Κρυστάλλωση πρωτεϊνών (Σ.Ε. Ζωγράφος)

Άσκηση: Υπολογισμός σταθεράς αναστολής

Πέμπτη 8 Μαΐου

Πρωτεϊνική κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ (Ε.Δ. Χρυσίνα)

Άσκηση: Κρυστάλλωση πρωτεϊνών

Πέμπτη 15 Μαΐου

Συλλογή κρυσταλλογραφικών δεδομένων

Θα πραγματοποιηθεί επίσκεψη στο Κέντρο Κρυσταλλογραφίας Μακρομορίων, Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

Πέμπτη 22 Μαΐου

Τίτλος Επεξεργασία κρυσταλλογραφικών δεδομένων - Προσδιορισμός και βελτιστοποίηση της τρισδιάστατης κρυσταλλικής δομής (Σ.Ε. Ζωγράφος)

Άσκηση: Χρήση λογισμικού για κρυσταλλογραφικές εφαρμογές

Πέμπτη 29 Μαΐου

Τίτλος: Ανάλυση της μακρομοριακής δομής για το σχεδιασμό φαρμάκων - Νέες προσεγγίσεις (Ε.Δ. Χρυσίνα)

Άσκηση: Χρήση λογισμικού μοριακών γραφικών για την απεικόνιση/ ανάλυση της 3D δομής

Πέμπτη 5 Ιουνίου

Computational Drug Design: Exploitation of X-ray Structure & Kinetic Data for Binding of Ligands to Receptors in the Design of More Potent Inhibitors using Molecular Docking (Joe Hayes)

Παρασκευή 6 Ιουνίου

Ορθολογικός σχεδιασμός φαρμάκων με βάση τη δομή (Ν.Γ. Οικονομάκος)

Συζήτηση

Μετά το πέρας των μαθημάτων, οι φοιτητές θα προετοιμάσουν σχετικές εργασίες τις οποίες θα παρουσιάσουν.