



**Διημερίδα «Νέες τεχνικές σχεδιασμού φαρμάκων -  
Μελέτη της δράσης τους σε μοριακό επίπεδο»**

7-8 Οκτωβρίου 2013

**Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών**



**Πρόγραμμα 1<sup>ης</sup> Μέρας**

Ώρα	Τίτλος	Περιεχόμενα
10.00-10.30	Δράση φαρμάκων σε μοριακό επίπεδο	Περιγραφή του τρόπου δράσης φαρμάκων.
10.30-11.30	Εισαγωγή στη Μοριακή Δυναμική	Βασική θεωρία, συστήματα, εφαρμογές, περιγραφή αποτελεσμάτων.
11.30-12.00	Μοριακές αλληλεπιδράσεις και εισαγωγή στην κβαντική μηχανική	Βασικές έννοιες της κβαντικής μηχανικής. Θεωρία Διαμοριακών Αλλ/σεων, Atoms in Molecules (AIM) προσέγγιση.
12.00-12.30	Διάλειμμα	
12.30-13.45	Πρακτική εξάσκηση (AMBER)	Προετοιμασία και προσομοίωση βιολογικού συστήματος με ΜΔ.
13.45-14.15	Διάλειμμα – Ελαφρύ γεύμα	
14.15-15.00	Πρακτική εξάσκηση (AMBER)	Οπτικοποίηση και ανάλυση αποτελεσμάτων
15.00-15.45	Πρακτική εξάσκηση (Ανάλυση αλληλεπιδράσεων)	1) Εξ' υπαρχής ( <i>ab-initio</i> ) υπολογισμοί για τον προσδιορισμό και την ανάλυση της ενέργειας αλλ/σης. 2) Εφαρμογή του AIM λογισμικού για την ανάλυση δεσμών υδρογόνου.

## Πρόγραμμα 2<sup>ης</sup> Μέρας

Ώρα	Τίτλος	Περιεχόμενα
10.00-10.20	Εικονική Σάρωση (Virtual Screening) βιβλιοθηκών μορίων	Γενική Ανασκόπηση των μεθόδων
10.20-11.00	Δημιουργία φαρμακοφόρων μοντέλων	Structure & Ligand base, Actives, Inactives, Decoys, ROC curves
11.00-11.15	Διάλειμμα	
11.15-11.45	Διαδοχικά φίλτρα στην εικονική σάρωση	Προετοιμασία χημειοθηκών, αρχικό φιλτράρισμα (remove salts, Lipinski rules, chiral centers etc.) ADMET filtering
11.45- 12.15	Βελτιστοποίηση δομής (Hit-to-Lead optimization) με χρήση πειραματικών δεδομένων	STD NMR ή/και in vitro μελέτες πρόσδεσης
12.15 -12.30	Διάλειμμα	
12.30 -13.45	Πρακτική Εξάσκηση Μέρος 1	Φαρμακοφόρα μοντέλα
13.45 -14.15	Διάλειμμα – Ελαφρύ γεύμα	
14.15 -15.45	Πρακτική Εξάσκηση Μέρος 2	Εικονική σάρωση

### Οργανωτική Επιτροπή

Μάνθος Παπαδόπουλος

Παναγιώτης Ζουμπουλάκης

Κωνσταντίνος Ποταμίτης

Ευτυχία Κρίση

Άγγελος Αβραμόπουλος

Γιώργος Λεώνης

Χαράλαμπος Τζούπης