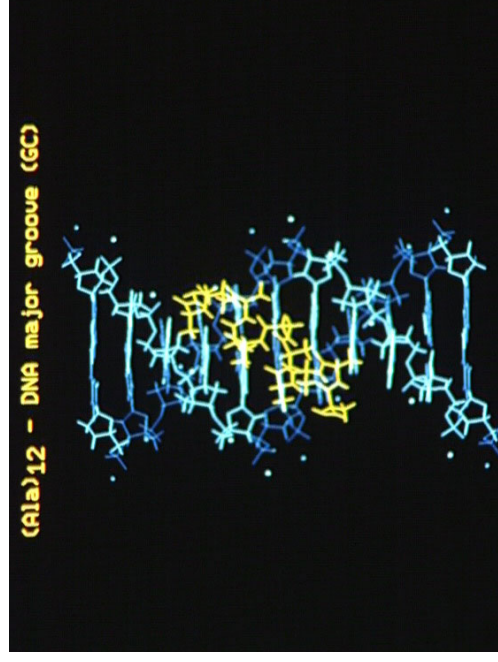


ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

(Υπ.αρ.2 καταναλωτής υπολογιστικής ισχύος παγκοσμίως)

α.Βιοπληροφορική β.Σχεδιασμός Υλικών

Γονιδίωμα, Μέτα-Γονιδίωμα και Πρωτεομική



Διερεύνηση στρατηγικών που διευκολύνουν την κοινή χρήση γενομικών βάσεων δεδομένων και ελέγχουν αλγόριθμους φιλικούς στο grid για συγκριτική γενωμική.

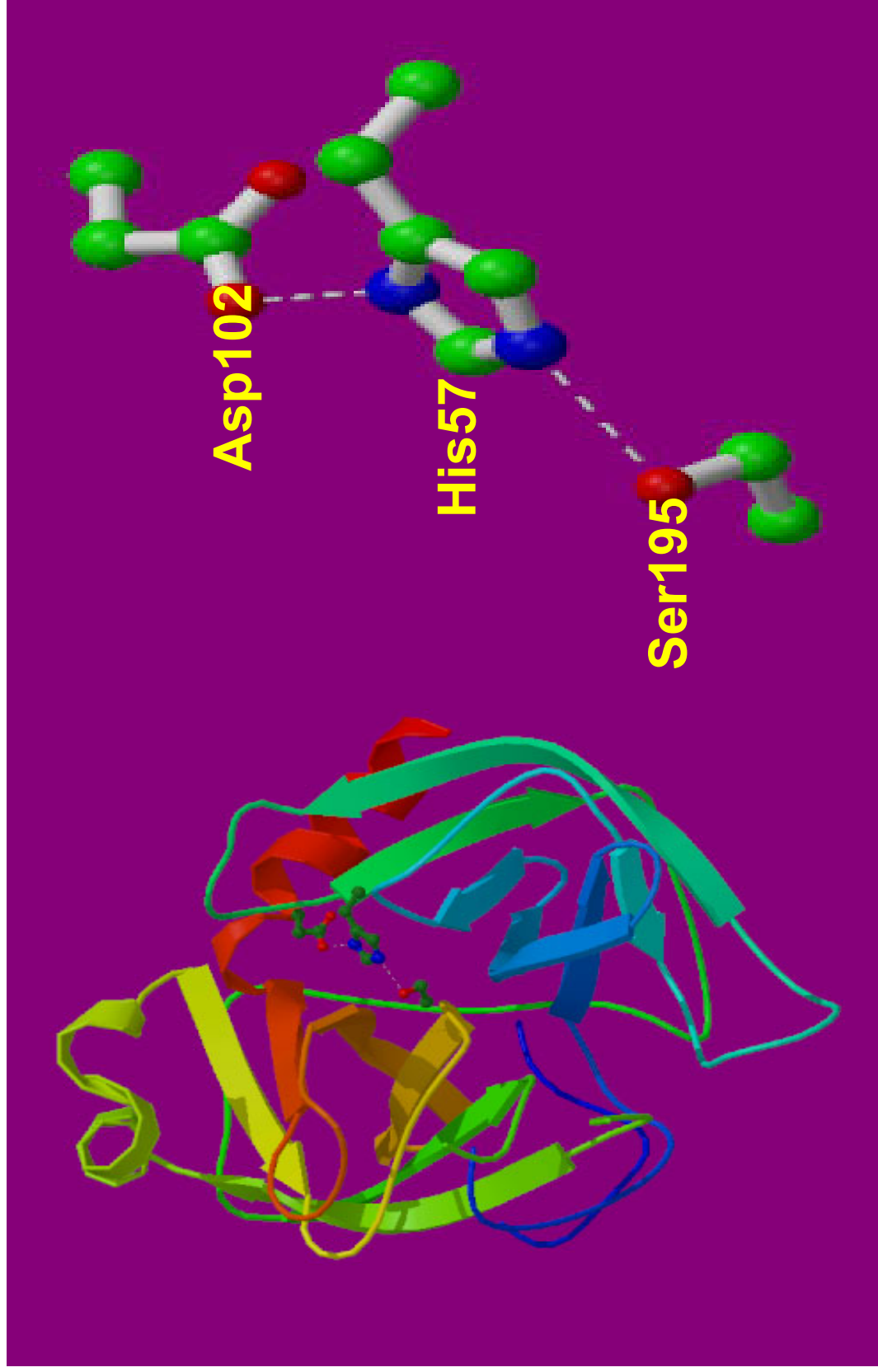
ΒΙΟΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗ

- ◆ Εφαρμογές
 - Φυλογενετική
 - Στατιστική Γενετική
 - Web-Portal Βιοπληροφορικής
 - Data-mining πάνω σε DNA chips
 - Τρισδιάστατες γεωμετρικές συγκρίσεις πρωτεϊνών
 - α. Σχεδιασμός Φαρμάκων (Drug Design)
 - β. Βιοτεχνολογία (Τεχνητά Ένζυμα)
 - γ. MS - Πρωτεϊμική (VL MS-PDB)
 - δ. TROSY – Πρωτεϊμική (VL NMR-PDB)

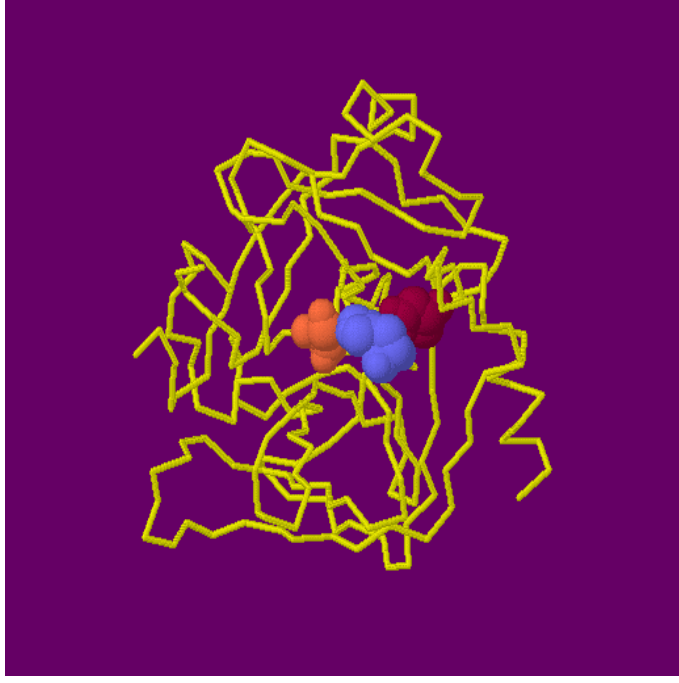
Ένα παράδειγμα Βιοληροφορικής. Τεχνητές Πρωτεΐνες

- **Καταλύουν αντιδράσεις**
- **Αποθηκεύουν μικρά μόρια και ιόντα**
- **Μεταφέρουν ύλη**
- **Μεταφέρουν μηνύματα**
- **Ρυθμίζουν κυτταρικές λειτουργίες**
- **Συμμετέχουν στην άμυνα του οργανισμού**
- **Έχουν δομικό ρόλο**

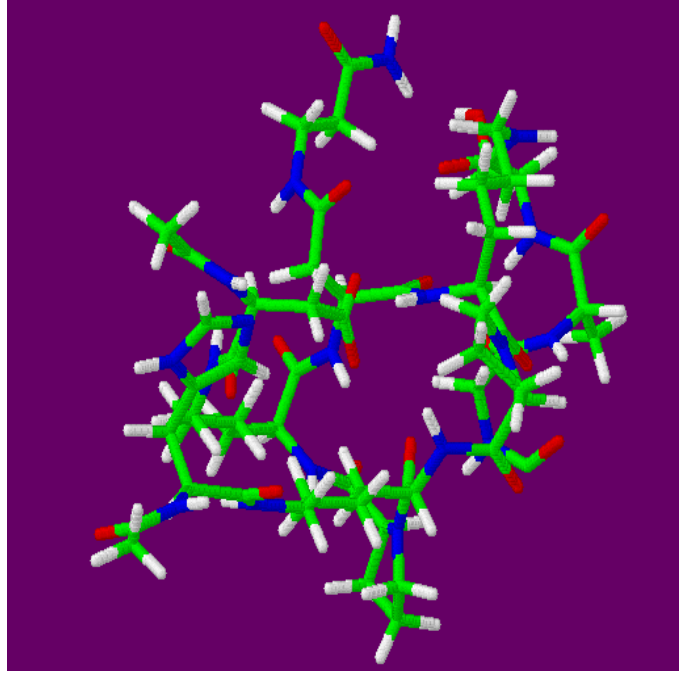
Τριτοταγής δομή της α-χυμοθρυψίνης με έμφαση στο ενεργό κέντρο



Σκοπός



Χυμοθρυψίνη
245 αμινοξέα



καταλυτική
περιοχή

Πεπτιδίο-πρότυπο
12 αμινοξέα

Διάγραμμα ροής

Προσομοίωση
16 CPUs

Κατασκευή
Πεπτιδίου - προτύπου

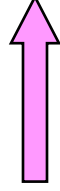
Ενεργειακή
ελαχιστοποίηση

RMS
σύγκριση

D- / L-

ενεργό
κέντρο
θρυψίνης

M Δ Υ Θ
220 ps



Συμπεράσματα

- Η Μοριακή Δυναμική χρησιμοποιήθηκε επιτυχώς ως τεχνική σχεδιασμού δραστικών μορίων.
- Το πεπτίδιο με D-Asp επιταχύνει την υδρόλυση 4 φορές σε σχέση με το L-Asp.
- Από 200 μόρια η προσομοίωση επέλεξε ένα που συντέθηκε στο εργαστήριο με καταλυτική δράση περίπου 80 φορές πάνω.
- **Κόστος σύνθεσης 15000 euro/μόριο, με την προσομοίωση περιορίστηκε το κόστος στο 1%.**
- Η συνδυαστική υπολογιστική χημεία αποτελεί ελπιδοφόρο προοπτική για τον σχεδιασμό περισσότερο δραστικών ουσιών.
- **Με την τεχνολογία των Grids ελπίζεται ότι η δυνατότητα παρασκευής τεχνητών ενζύμων θα γίνει πραγματικότητα.**