



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
Εθνικό και Καποδιστριακό
Πανεπιστήμιο Αθηνών

ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΛΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ
ΤΕΙ ΑΘΗΝΩΝ (ΤΜΗΜΑ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΙΑΤΡΙΚΩΝ ΟΡΓΑΝΩΝ)
ΑΚΑΔΗΜΙΑ ΑΘΗΝΩΝ (ΙΔΡΥΜΑ ΙΑΤΡΟΒΙΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΡΕΥΝΩΝ)
ΕΚΕΦΕ ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ (ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΛΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ)

 Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ
ΣΤΗΝ ΙΑΤΡΙΚΗ ΚΑΙ ΤΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ

Μοριακή Μοντελοποίηση Βιομορίων

Δρ. Ζωή Κούρνια

Ερευνήτρια Δ', Ινστιτούτο Ιατροβιολογικών Ερευνών της Ακαδημίας Αθηνών, Κέντρο
Βασικής Έρευνας Ι, Τομέας Φαρμακολογίας-Φαρμακοτεχνολογίας.

Τηλέφωνο: 210-6597195, email: zcournia@bioacademy.gr

Περίληψη: Το μάθημα εισάγει τους φοιτητές στις έννοιες και τις εφαρμογές της μοριακής μοντελοποίησης βιομορίων με σκοπό να διδάξει πώς σύγχρονες υπολογιστικές τεχνικές εφαρμόζονται σε βιομοριακά προβλήματα όπως ο σχεδιασμός φαρμάκων ή η αναδίπλωση πρωτεϊνών. Το μάθημα αναμένεται να πραγματοποιηθεί σε αίθουσα με υπολογιστές ώστε να πραγματοποιούνται διαδραστικές υπολογιστικές ασκήσεις.

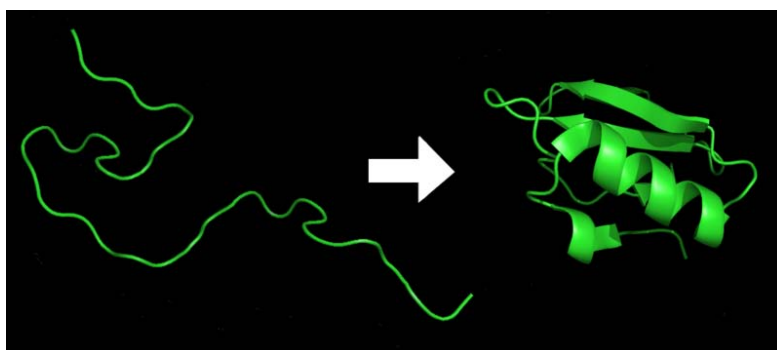
Στόχοι: Το μάθημα επικεντρώνεται σε θεματικές περιοχές όπου οι υπολογιστικές τεχνικές έχουν ισχυρό αντίκτυπο: 1) Δομή και αναδίπλωση πρωτεϊνών, 2) Δομή μεμβρανών και μεμβρανικών πρωτεϊνών, 3) Δυναμική πρωτεϊνών, 4) Σχεδιασμός φαρμάκων μέσω υπολογιστή

Οι φοιτητές αναμένεται να 1) ενισχύσουν και να εμβαθύνουν την κατανόηση βιολογικών και χημικών εννοιών, 2) αποκτήσουν εμπειρία σε μοντέρνες τεχνικές μοριακής μοντελοποίησης μέσω ασκήσεων σε υπολογιστή, 3) κατανοήσουν την εφαρμογή υπολογιστικών τεχνικών σε προβλήματα ιατρικής και βιολογικής φύσεως.

Προϋποθέσεις: Το μάθημα απευθύνεται στις κατευθύνσεις Πληροφορική στην Ιατρική και Βιοπληροφορική. Οι φοιτητές πρέπει να έχουν ήδη μία καλή κατανόηση βιολογικών και χημικών εννοιών πανεπιστημιακού επιπέδου (Βιολογία Ι, Γενική Χημεία).

Εβδομαδιαίο Πρόγραμμα

- 1^η εβδομάδα: Εισαγωγή στις βασικές αρχές της μοριακής μοντελοποίησης βιομορίων και στο λογισμικό που θα χρησιμοποιηθεί στο μάθημα
- 2^η Εβδομάδα: Πρωτεϊνική Δομή και οπτικοποίηση βιομορίων στον υπολογιστή
- 3^η Εβδομάδα: Μοριακή μοντελοποίηση και αναδίπλωση πρωτεϊνών



- 4^η Εβδομάδα: Μεμβράνες και μεμβρανικές πρωτεΐνες
- 5^η Εβδομάδα: Τεχνικές προσδιορισμού δομής βιομορίων (κρυσταλλογραφία, φασματοσκοπία NMR, σκέδαση νετρονίων)
- 6-7^η Εβδομάδα: Μοριακές Δυναμικές Προσομοιώσεις Πρωτεϊνών
- 8^η Εβδομάδα: Αρμονικές Ταλαντώσεις Βιομορίων
- 9^η Εβδομάδα: DNA, Μελέτη Δομής και Λειτουργίας μέσω τεχνικών μοριακής μοντελοποίησης
- 10^η - 11^η Εβδομάδα: Σχεδιασμός φαρμάκων μέσω υπολογιστή
- 12^η Εβδομάδα: Μελέτη ενζύμων και σύμπλοκων βιομορίων. Περιορισμοί στη μελέτη βιομορίων μέσω μοριακής μοντελοποίησης

Σύντομο Βιογραφικό



Η Ζωή Κούρνια είναι απόφοιτος του Τμήματος Χημείας του Πανεπιστημίου Αθηνών. Έλαβε το διδακτορικό της από το Πανεπιστήμιο της Χαϊδελβέργης, Γερμανία υπό την επίβλεψη του Prof. Jeremy Smith στην υπολογιστική Βιοφυσικοχημεία. Στη συνέχεια εργάστηκε ως μεταδιδακτορικός ερευνητής στον τομέα του υπολογιστικού σχεδιασμού φαρμάκων στο εργαστήριο του Prof. Bill Jorgensen στο Πανεπιστήμιο Γέιλ των ΗΠΑ. Στο Γέιλ, οι έρευνες της επικεντρώθηκαν στο σχεδιασμό και ανακάλυψη νέων αντι-καρκινικών μορίων χρησιμοποιώντας υπολογιστικές τεχνικές. Η έρευνά της, που χρηματοδοτήθηκε από την Αμερικανική Ένωση κατά του Καρκίνου, εστιάστηκε στην αναστολή της πρωτεΐνης

Migration Inhibitory Factor (MIF), η οποία έχει αναγνωρισθεί ως προ-φλεγμονώδης και προ-ογκογενής παράγοντας. Η εργασία της οδήγησε στην ανακάλυψη πολλών μικτών μορίων - αναστολέων της πρόσδεσης της πρωτεΐνης στον υποδοχέα της, τα οποία εμπλέκονται τώρα σε προκλινικές μελέτες στην Ιατρική Σχολή του Γέιλ. Το 2009 η Δρ. Κούρνια προάχθηκε σε Λέκτορα του Γέιλ, όπου δίδαξε το μάθημα «Μοριακή Μοντελοποίηση Βιομορίων». Το 2007-2008 ήταν πρόεδρος της Φαρμακευτικής και Βιοτεχνολογικής Εταιρείας του Γέιλ και το 2009 τιμήθηκε με το βραβείο «Καινοτόμος Γυναίκα» από το Τεχνολογικό Συμβούλιο του Κονέκτικατ.

Από το 2009 είναι Ερευνήτρια Δ' στο ΙΙΒΕΑΑ, όπου επικεντρώνει τις έρευνές της στην ανακάλυψη νέων υποψηφίων φαρμάκων κατά του καρκίνου μελετώντας την αναστολή της μεταλλαγμένης πρωτεΐνης PI3Kα, της αλληλεπίδρασης των πρωτεϊνών Myc-Max και του συμπλέγματος πρωτεϊνών Arp2/3. Για τις μελέτες αυτές το εργαστήριο Κούρνια χρησιμοποιεί μία πληθώρα υπολογιστικών τεχνικών όπως Μοριακή Δυναμική, εικονική αξιολόγηση, σχεδιασμός φαρμάκων 'εκ νέου', πρόβλεψη φαρμακολογικών ιδιοτήτων και προσομοιώσεις Monte Carlo.