

Μεταπτυχιακός φοιτητής: **Ευδοξία Μαστρολέων**

Τίτλος διπλωματικής εργασίας:

Ανάπτυξη ηλεκτρονικού εργαστηριακού τετραδίου ορθολογικού σχεδιασμού φαρμάκων

Περίληψη:

Η μελέτη της τρισδιάστατης δομής μακρομοριακών στόχων για το σχεδιασμό/σύνθεση νέων εν δυνάμει φαρμάκων περιλαμβάνει μια σειρά πολυεπιστημονικών εφαρμογών *in vitro*, *in silico* και *in vivo*. Συνεπώς, η καταγραφή και διατήρηση ενός ενημερωμένου αρχείου για την εξέλιξη των εφαρμογών αυτών είναι καθοριστικής σημασίας, ιδιαίτερα μετά την ραγδαία ανάπτυξη τεχνολογιών αιχμής, όπως η ρομποτική, και την πληθώρα πληροφοριών που παρέχουν. Το αντικείμενο μελέτης της παρούσας εργασίας αφορά στην ανάπτυξη ενός ηλεκτρονικού εργαστηριακού τετραδίου για τον ορθολογικό σχεδιασμό φαρμάκων. Στόχος είναι η αποτύπωση των αποτελεσμάτων των επί μέρους σταδίων του κατευθυνόμενου από τη δομή σχεδιασμού φαρμάκων, όπως εφαρμόζεται στην περίπτωση της φωσφορυλάσης του γλυκογόνου για την αντιμετώπιση του διαβήτη τύπου 2.

Η εργασία περιλαμβάνει την ανάπτυξη μιας βάσης δεδομένων για την καταχώρηση οργανικών ενώσεων-εν δυνάμει φαρμάκων, που συντίθενται και μελετώνται ως σύμπλοκα με το μακρομοριακό στόχο, την καταχώρηση των αποτελεσμάτων κινητικών πειραμάτων, κρυσταλλογραφικών πειραμάτων περίθλασης ακτίνων Χ, καθώς και πληροφορίες που αφορούν σε σχετικές μελέτες που διεξάγονται για τις συγκεκριμένες ενώσεις και αφορούν τα υπόλοιπα στάδια του ορθολογικού σχεδιασμού εν δυνάμει φαρμάκων ή/και άλλες βιβλιογραφικές μελέτες.

Η εφαρμογή παρέχει, επίσης, τη δυνατότητα γρήγορης αναζήτησης και συγκριτικής μελέτης ενός συνόλου πειραμάτων με κοινά χαρακτηριστικά, την αυτοματοποίηση των υπολογισμών ρουτίνας, την αποθήκευση εικόνων-γραφημάτων για την καλύτερη κατανόηση των επί μέρους διεργασιών και ένα πλήρες σύστημα διαχείρισης των χρηστών για την ασφαλή πρόσβαση και χρήση των δεδομένων που καταχωρούνται. Η εφαρμογή συνεισφέρει στην οργάνωση των δεδομένων, στην ασφαλή διάχυση των δεδομένων μεταξύ των επιστημονικών ομάδων, στην παρακολούθηση της εξέλιξης των εργασιών που επιτελούνται από τους επί μέρους συνεργάτες, προάγοντας και διασφαλίζοντας την ομαλή συνεργασία των επιστημόνων που εργάζονται για ένα συγκεκριμένο στόχο, καθώς και την αποτελεσματικότερη και ακριβέστερη έρευνα. Σε αυτό συνεισφέρει και η δυνατότητα απομακρυσμένης πρόσβασης της εφαρμογής μέσω δικτύου.

Η ανάπτυξη εργαλείου με το όνομα LabBook αποτελεί την πρώτη προσπάθεια δημιουργίας λογισμικού διαχείρισης εργαστηριακών δεδομένων που αφορούν μια συγκεκριμένη εφαρμογή με δυνατότητες επέκτασης για να προσαρμοστεί και σε άλλες αντίστοιχες του ίδιου πεδίου έρευνας. Στο πλαίσιο της παρουσίασης θα γίνει και επίδειξη του LabBook.

Εξεταστική Επιτροπή

Δρ. Ιωάννης Εμίρης, Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Δρ. Ηλίας Μανωλάκος, Αν. Καθηγητής, Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών - Επιβλέπων

Δρ. Ευαγγελία Χρυσίνα, Επιστημονικό Προσωπικό του ΙΟΦΧ, ΕΙΕ - Συν-επιβλέπουσα