

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ-ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

3. Υπολογιστική απεικόνιση (μεγαλο)μορίων και προσδιορισμός των δραστικών περιοχών τους με χρήση του open source λογισμικού VMD

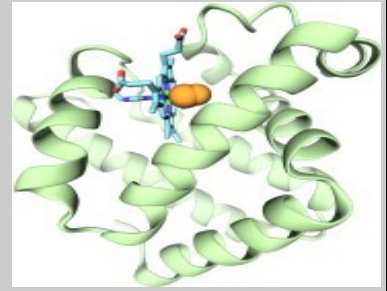
ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: ΔΕΥΤΕΡΑ 12/6/2017

ΩΡΑ: 09:00-11:00

ΤΟΠΟΣ: ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ

ΑΙΘΟΥΣΑ: ΣΕΜΙΝΑΡΙΩΝ

υπο του Δρος Δημητρίου Ξενίδη



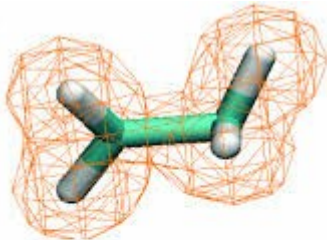
ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το VMD σχεδιάστηκε για την απεικόνιση, για την προσομοίωση, την οπτικοποίηση, και την ανάλυση βιολογικών συστημάτων όπως πρωτεϊνών, νουκλεικών οξέων καθώς και άλλων μορίων. Έχει τη δυνατότητα να “διαβάσει” αρχεία τύπου Protein Data Bank (PDB) και να απεικονίσει τη δομή. Για το σκοπό αυτό παρέχει πληθώρα μεθόδων για *rendering* και χρωματισμό ενός μορίου: simple points and lines, CPK spheres and cylinders, licorice bonds, backbone tubes and ribbons, cartoon drawings. Επίσης το VMD μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην ανάλυση προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής.

Στα πλαίσια του μαθήματος έμφαση θα δοθεί

- στην λήψη και εγκατάσταση του προγράμματος
- στην χρήση του για απεικόνιση-ανάλυση πρωτεϊνών
- στην απεικόνιση HOMO-LUMO τροχιακών
- στην οπτικοποίηση μοριακών προσομοιώσεων

CH_2^+



CH_3^+

