

Baltymų struktūrinių pokyčių tyrimas prie jų jungiantis vaistinėms molekulėms in silico

Vilnius,
2016 spalio 11

Vytautas Rafanavičius
vytautas.rafanavicius@bpti.lt
+37062666602

Problema



$$\blacktriangleright \beta_T = -\frac{1}{V_p} \left(\frac{\partial V_p}{\partial P} \right)_T$$

Problema



- ▶ (β_T) Eksperimentiškai skaičiuoti neekonomiška!

$$\beta_T = -\frac{1}{V_p} \left(\frac{\partial V_p}{\partial P} \right)_T$$

Problema



- ▶ (β_T) Eksperimentiškai skaičiuoti neekonomiška!
- ▶ Jungimosi (β_{bT}) duomenų nedaug!

$$\blacktriangleright \beta_T = -\frac{1}{V_p} \left(\frac{\partial V_p}{\partial P} \right)_T$$

Problema

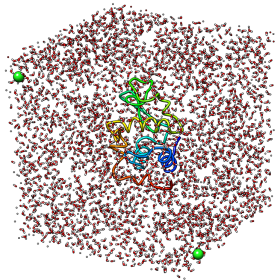


- ▶ (β_T) Eksperimentiškai skaičiuoti neekonomiška!
- ▶ Jungimosi (β_{bT}) duomenų nedaug!
- ▶ Sunku suskaičiuoti ligando jėgos lauką

$$\blacktriangleright \beta_T = -\frac{1}{V_p} \left(\frac{\partial V_p}{\partial P} \right)_T$$

Sprendimas

- ▶ Molekulinė dinamika



Nauda Mokslui

- ▶ Skaitmeniniais metodais išspręsimė β_T
- ▶ Nustatysime metodų greitį ir patikimumą

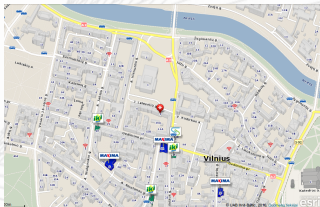
Nauda Mokslui

- ▶ Skaitmeniniais metodais išspręsimė β_T
- ▶ Nustatysime metodų greitį ir patikimumą

Nauda Studentams

- ▶ Išmoksite dirbti su MD įrankiais
- ▶ Išmoksite rengti dokumentus ir tvarkyti bibliografiją su Latex
- ▶ Išmoksite projektų valdymo pagrindų

Kur? Kontaktai



- ▶ J. Lelevelio g. 4
- ▶ Vytautas Rafanavičius
- ▶ +37062666602
- ▶ vytautas.rafanavicius@bpti.lt
- ▶

<http://web.vu.lt/gf/v.rafanavicius/public/students/>

Kur? Kontaktai

