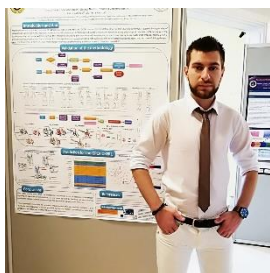


ΠΡΟΣΩΠΙΚΕΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΕΣ

**Αθανάσιος Α. Παναγιωτόπουλος**

📍 Ροδιά Ηλείας, 27069 Αμαλιάδα (Ελλάδα)

☎ +30 694 941 3089

✉ athpanagiotoyopoulos@hotmail.com

💬 Skype Thanasis.Panagiotoyopoulos

Φύλο Άρρεν | Ημερομηνία γέννησης 13 Αυγ 1991 | Εθνικότητα Ελληνική

ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

(14/07/2021–Σήμερα)

Μεταδιδακτορική Έρευνα

Εργαστήριο Εργαστηριακής Ενδοκρινολογίας, Τομέας Εργαστηριακής Ιατρικής, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Σχολή Ιατρικής. Υπ. Καθ. Δρ. Μαρία-Ελένη Καμπά. Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).
<http://www.med.uoc.gr/>

- Σχεδιασμός ειδικών ανταγωνιστών του μεμβρανικού υποδοχέα των ανδρογόνων, OXER1.

Επιχείρηση ή κλάδος Ανώτατη Εκπαίδευση

(20/11/2017–14/07/2021)

Διδακτορική Διατριβή

Εργαστήριο Εργαστηριακής Ενδοκρινολογίας, Τομέας Εργαστηριακής Ιατρικής, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Σχολή Ιατρικής. Υπ. Καθ. Δρ. Μαρία-Ελένη Καμπά. Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).
<http://www.med.uoc.gr/>

- Ανεύρεση και μελέτη του μηχανισμού δράσης νέων μικρομοριακών ουσιών που δεσμεύονται στο μεμβρανικό υποδοχέα των ανδρογόνων, OXER1.

Επιχείρηση ή κλάδος Ανώτατη Εκπαίδευση

(01/09/2014–23/06/2017)

Βοηθός Προπτυχιακών Εργαστηρίων Ανόργανης Χημείας

Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας. Υπ. Καθ. Δρ. Αθανάσιος Γ. Κουτσολέλος και Ελευθερία Βαρδαλαχάκη. Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).
<http://eilotas.chemistry.uoc.gr/uocchem/>

- Παρασκευή και ανακύκλωση χημικών αντιδραστηρίων,
- Επίβλεψη των προπτυχιακών φοιτητών,
- Διδασκαλία θεμάτων ανόργανης χημείας.

Επιχείρηση ή κλάδος Ανώτατη Εκπαίδευση

- (22/06/2015–16/07/2015) **Συμμετοχή σε Πειράματα στο Κέντρο Πυρηνικών Ερευνών-CEA**
Commissariat a l' Energie Atomique (CEA). Υπ. Καθ. Δρ. Vincent Artero,
Cedex Grenoble, 38054 Grenoble (Γαλλία).
<http://www.cea.fr/Pages/le-cea/les-centres-cea/grenoble.aspx>
- Μελέτη νέων καταλυτών για φωτοχημική και ηλεκτροχημική παραγωγή καύσιμου υδρογόνου.
- Επιχείρηση ή κλάδος** Ανώτατη Εκπαίδευση
- (01/09/2014–27/01/2016) **Μεταπτυχιακή Εργασία**
Εργαστήριο Βιοανόργανης Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας.
Υπ. Καθ. Δρ. Αθανάσιος Γ. Κουτσολέλος.
Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).
<http://eilotas.chemistry.uoc.gr/uocchem/>
- Φωτοκαταλυτική παραγωγή H₂ με μεταλλοπορφυρίνες.
- Επιχείρηση ή κλάδος** Ανώτατη Εκπαίδευση
- (20/02/2014–03/07/2014) **Διπλωματική Εργασία**
Εργαστήριο Βιοανόργανης Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας.
Υπ. Καθ. Δρ. Αθανάσιος Γ. Κουτσολέλος.
Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).
<http://eilotas.chemistry.uoc.gr/uocchem/>
- Σύνθεση και χαρακτηρισμός νέων πορφυρινικών παραγώγων.
- Επιχείρηση ή κλάδος** Ανώτατη Εκπαίδευση
- (01/07/2013–30/09/2013) **Πρακτική Άσκηση**
Γενικό Νοσοκομείο Αμαλιάδας, Τμήμα Βιοχημείας – Μικροβιολογίας.
Υπ. Ευθυμία Σαΐνατουόδη, Ευαγγελιστριάς 122, 27200 Αμαλιάδα (Ελλάδα).
- Χημικές – Βιοχημικές – Μικροβιολογικές Αναλύσεις.
- Επιχείρηση ή κλάδος** Δραστηριότητες σχετικές με την ανθρώπινη υγεία και την κοινωνική μέριμνα
- (01/11/2011–10/02/2012) **Προπτυχιακός Βοηθός Εργαστηρίου Γενικής Χημείας**
Εργαστήριο Γενικής Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας. Υπ. Δρ. Σπυρίδων Κορνήλιος.
Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).
<http://eilotas.chemistry.uoc.gr/uocchem/>
- Παρασκευή Χημικών Αντιδραστηρίων.
- Επιχείρηση ή κλάδος** Ανώτατη Εκπαίδευση

ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΚΑΤΑΡΤΙΣΗ

(2021–Σήμερα)	Μεταδιδάκτορας Ιατρικής Σχολής Πανεπιστήμιο Κρήτης, Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).	ΕΠΠ επίπεδο 10
(2017–2021)	Διδάκτορας Ιατρικής Σχολής Πανεπιστήμιο Κρήτης, Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).	ΕΠΠ επίπεδο 10
(2014–2016)	Κάτοχος Μεταπτυχιακού Διπλώματος στην Χημεία (9.83/10) Πανεπιστήμιο Κρήτης, Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).	ΕΠΠ επίπεδο 7
(2010–2014)	Απόφοιτος Τμήματος Χημείας (9.30/10) Πανεπιστήμιο Κρήτης, Πανεπιστημιούπολη Βουτών, 70013 Ηράκλειο (Ελλάδα).	ΕΠΠ επίπεδο 6
(2006–2009)	Απόφοιτος Λυκείου (19.1/20) Γενικό Λύκειο Σιμόπουλου Ηλείας, 27069 Εφύρα (Ελλάδα).	ΕΠΠ επίπεδο 4
(2003–2006)	Απόφοιτος Γυμνασίου (19.3/20) Γυμνάσιο Σιμόπουλου Ηλείας, 27069 Εφύρα (Ελλάδα).	ΕΠΠ επίπεδο 2
(1997–2003)	Απόφοιτος Δημοτικού Δημοτικό Σχολείο Ροδιάς Ηλείας, 27069 Εφύρα (Ελλάδα).	ΕΠΠ επίπεδο 1

ΑΤΟΜΙΚΕΣ ΔΕΞΙΟΤΗΤΕΣ

Μητρική γλώσσα Ελληνικά

Λοιπές γλώσσες

	ΚΑΤΑΝΟΗΣΗ		ΟΜΙΛΙΑ		ΓΡΑΦΗ
	Προφορική	Γραπτή (ανάγνωση)	Επικοινωνία	Προφορική έκφραση	
Αγγλικά	C2	C2	C2	C2	C2
Γαλλικά	C2	C2	C2	C2	C2

Επίπεδα: A1 και A2: Βασικός χρήστης - B1 και B2: Ανεξάρτητος χρήστης - C1 και C2: Έμπειρος χρήστης
Κοινό Ευρωπαϊκό Πλαίσιο Αναφοράς για Γλώσσες

Επικοινωνιακές δεξιότητες

Επικοινωνιακές δεξιότητες που αποκτήθηκαν κατά την διάρκεια της πτυχιακής εργασίας, της πρακτικής άσκησης, της ερευνητικής εργασίας του μεταπτυχιακού, της ερευνητικής εργασίας του διδακτορικού καθώς και των διεθνών συνεδρίων.

Οργανωτικές / διαχειριστικές δεξιότητες

Οργανωτικές και διαχειριστικές ικανότητες που αποκτήθηκαν κατά την διάρκεια της πτυχιακής εργασίας, της πρακτικής άσκησης, της θέσης του προπτυχιακού βοηθού, του μεταπτυχιακού βοηθού, της μεταπτυχιακής εργασίας και της διδακτορικής έρευνας.

Επαγγελματικές δεξιότητες

- Γνώση χρήσης και οργάνωσης εργαστηριακών συνθηκών,
- Γνώση χρήσης μεθόδων χημικής σύνθεσης,
- Γνώση χρήσης μεθόδων ποιοτικής ανάλυσης,
- Γνώση χρήσης μεθόδων ποσοτικής ανάλυσης,
- Γνώση χρήσης φασματομέτρου μάζας (Maldi-TOF),
- Γνώση χρήσης φασματοφωτομέτρου UV-Vis,
- Γνώση χρήσης συστήματος κυκλικής βολταμετρίας,
- Γνώση χρήσης φασματομέτρου NMR,
- Γνώση χρήσης αέριας και υγρής χρωματογραφίας,
- Γνώση χρήσης βιοχημικών αναλυτών,
- Γνώση χρήσης προγραμμάτων και μεθόδων μοριακής μοντελοποίησης,
- Γνώση χρήσης προγραμμάτων QSAR (Quantitative Structure - Activity Relationship),
- Γνώση χρήσης μεθόδων κυτταροκαλλιέργειας,
- Γνώση χρήσης μεθόδων μέτρησης και μελέτης ενδοκυτταρικών μεταβολιτών,
- Γνώση χρήσης μικροσκοπίων,
- Γνώση χρήσης in vitro και in silico μεθοδολογιών.

Ψηφιακή δεξιότητα

ΑΥΤΟΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ				
Επεξεργασία δεδομένων	Επικοινωνία	Δημιουργία Περιεχομένου	Ασφάλεια	Επίλυση προβλημάτων
Έμπειρος χρήστης	Έμπειρος χρήστης	Έμπειρος χρήστης	Έμπειρος χρήστης	Έμπειρος χρήστης

Ψηφιακές δεξιότητες - Πίνακας αυτοαξιολόγησης

Πιστοποιητικό από το Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου Κρήτης

- Γνώση χρήσης των εργαλείων Microsoft Office™,
- Γνώση χρήσης των εργαλείων OpenOffice™,
- Γνώση χρήσης των προγραμμάτων MATLAB,
- Γνώση χρήσης των προγραμμάτων XRay,
- Γνώση χρήσης των προγραμμάτων GC,
- Γνώση χρήσης των προγραμμάτων Origin,
- Γνώση χρήσης των προγραμμάτων BrukerNMR,
- Γνώση χρήσης των προγραμμάτων ChemDraw,
- Γνώση χρήσης των εργαλείων MicrosoftWorks™,
- Γνώση χρήσης των προγραμμάτων LabView,

- Γνώση χρήσης των προγραμμάτων QSAR,
- Γνώση χρήσης προγραμμάτων μοριακής μοντελοποίησης,
- Γνώση Χρήσης του υπερυπολογιστικού συστήματος Aris-GRNET.

Στρατιωτικές Υποχρεώσεις

Εκπλήρωση των στρατιωτικών υποχρεώσεων την περίοδο από 15/11/2021 έως 15/11/2022 στο 547 Αερομεταφερόμενο Τάγμα Πεζικού, στο 545 Αερομεταφερόμενο Τάγμα Πεζικού και στη Σχολή Εφέδρων Αξιωματικών Πεζικού (Σ.Ε.Α.Π.) με ειδικότητα Νοσηλεύτη και Υπασπιστή Ταξίαρχου.

ΠΡΟΣΘΕΤΕΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΕΣ

Τιμητικές διακρίσεις και βραβεία

1. Επιχορήγηση της Federation of American Societies for Experimental Biology (FASEB) με σκοπό την συμμετοχή στο συνέδριο "The Steroid Hormones and Receptors in Health and Disease, FASEB-RRSH 2021".
2. Χρηματοδότηση από το Εθνικό Δίκτυο Υποδομών Τεχνολογίας και Έρευνας για χρήση του υπερυπολογιστικού συστήματος Aris-GRNET, για πειράματα με θέμα: **Natural Products on OXER1: development of novel therapeutics for cancer and inflammatory diseases.**
3. Χρηματοδότηση για πρόσβαση στον υπερυπολογιστή Joliot-Curie Rome, GENCI στο CEA της Γαλλίας, για πειράματα με θέμα: **Epitope vaccines based on the dynamics of mutated SARS-CoV-2 proteins at all atom resolution** από το Πανερωπαϊκό πρόγραμμα: **PRACE Support to Mitigate Impact Of COVID-19 Pandemic.**
4. Ερευνητικό μέλος της χρηματοδοτούμενης, από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Τεχνολογίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.), έρευνας με τίτλο: **Deciphering the actions and pharmacological selectivity of the novel lipid/steroid GPCR, OXER1 in inflammation and cancer.**
5. Υποτροφία της Ελληνικής Εταιρείας Βιοχημείας & Μοριακής Βιολογίας με σκοπό την συμμετοχή στο 70^ο Πανελλήνιο Συνέδριο της ΕΕΒΜΒ.
6. Υποτροφία από το ΙΚΥ (Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών) για την εκπόνηση της διδακτορικής διατριβής στο πλαίσιο «Ενίσχυση του ανθρώπινου ερευνητικού δυναμικού μέσω της υλοποίησης διδακτορικής έρευνας», 2^{ος} Κύκλος ΣΤΟ ΠΛΑΙΣΙΟ ΤΟΥ ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟΥ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΟΣ "ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΑΝΘΡΩΠΙΝΟΥ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ".
7. Χρηματοδότηση από το Εθνικό Δίκτυο Υποδομών Τεχνολογίας και Έρευνας για χρήση του υπερυπολογιστικού συστήματος Aris-GRNET, για πειράματα με θέμα: **Natural Products on OXER1.**
8. Δεκτός για υποτροφία από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Τεχνολογίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.) για την εκπόνηση της διδακτορικής διατριβής.
9. Βραβείο Αριστείας 2017 από τον πολιτιστικό σύλλογο Ροδιάς.
10. Μετάλλιο Αριστείας 2017 από τον πολιτιστικό σύλλογο Έκφρασης Σιμόπουλου.
11. 1^ο Βραβείο από την Royal Society of Chemistry για την καλύτερη ερευνητική εργασία- Ηράκλειο, Κρήτη, Ελλάδα, 21 Οκτωβρίου 2016.
12. Υποτροφία PERSPECT H2O COST Action CM 1202 για συμμετοχή σε διεθνές συνέδριο στο Milazzo, Ιταλία, Σεπτέμβριος 2016.

13. Υποτροφία PERSPECT H2O COST Action CM 1202 για συμμετοχή σε διεθνές συνέδριο στην Tarragona, Ισπανία, Απρίλιος 2016.
14. Υποτροφία Κληροδοτήματος Μαρίας Μιχαήλ Μανασσάκη 2014-2015.
15. Υποτροφία PERSPECT H2O COST Action CM 1202 για συμμετοχή σε διεθνές συνέδριο στο Engelberg, Ελβετία, Νοέμβριος 2015.
16. Υποτροφία PERSPECT H2O COST Action CM 1202 για συμμετοχή σε διεθνές συνέδριο στο Gdansk, Πολωνία, Σεπτέμβριος 2015.
17. Υποτροφία PERSPECT H2O COST Action CM 1202 για συμμετοχή σε πειράματα στο Κέντρο Πυρηνικών Ερευνών-CEA – Γαλλία.
18. 1^{ος} σε βαθμολογία απόφοιτος του τμήματος από το 1987 (1050 απόφοιτοι).
19. Πρωτεύσας του τμήματος Χημείας κατά την ορκωμοσία των πτυχιούχων (Ιούλιος 2014).
20. Πρωτεύσας κατά την επιλογή μεταπτυχιακών φοιτητών στο τμήμα Χημείας (Ιούλιος 2014).
21. Υποτροφία κοινωφελούς ιδρύματος Ι. Λάτση για το Ακ. Έτος 2012 – 2013.
22. Υποτροφία κοινωφελούς ιδρύματος Ι. Λάτση για το Ακ. Έτος 2011 – 2012.
23. Βραβείο κοινωφελούς ιδρύματος Ι. Λάτση "Άριστοι" (Ανώτερος βαθμός πρόσβασης για την τριτοβάθμια εκπαίδευση-Δήμος Πηνειάς), Σιμόπουλο 2009.
24. 1^ο Βραβείο Eurobank EFG "Η Μεγάλη Στιγμή για την Παιδεία" (Ανώτερος βαθμός πρόσβασης για την τριτοβάθμια εκπαίδευση) – Δήμος Πηνειάς, Τρίπολη 2009.
25. Βραβείο Προόδου Σχ. Έτους 2008-2009 "Σύλλογος Έκφραση", Δήμος Πηνειάς, Εφύρα 2009.
26. Αριστείο και Βραβείο Προόδου Σχ. Έτους 2008 – 2009 (βαθμός 19,1).
27. Βραβείο Προόδου Σχ. Έτους 2007 – 2008 "Σύλλογος Έκφραση", Δήμος Πηνειάς, Εφύρα 2008.
28. Αριστείο και Βραβείο Προόδου Σχ. Έτους 2007 – 2008 (βαθμός 19,2).
29. 1^ο Βραβείο Σχ. Διαγωνισμού Εκπαιδευτηρίων ΓΕΙΤΟΝΑ (Θέμα: Συγγραφή Πραγματείας για την αναδιοργάνωση της Πυρόπληκτης Ηλείας, συμμετέχοντες μαθητές των λυκείων του Ν. Ηλείας), Πύργος 2008.
30. 1^ο Βραβείο καλύτερης έκθεσης Κ.Ε.Τ.Α. Δυτικής Ελλάδας με θέμα "Μια βιώσιμη Επιχειρηματική Ιδέα" (Συμμετέχοντες μαθητές από τα λύκεια Δυτικής Ελλάδας", Πάτρα 2008.
31. Βραβείο Προόδου Σχ. Έτους 2006 – 2007 "Σύλλογος Έκφραση", Δήμος Πηνειάς, Εφύρα 2007.
32. Αριστείο και Βραβείο Προόδου Σχ. Έτους 2006 – 2007 (βαθμός 18,6).
33. Αριστείο και Βραβείο Προόδου Σχ. Έτους 2005 – 2006 (βαθμός 19,3).
34. Αριστείο και Βραβείο Προόδου Σχ. Έτους 2004 – 2005 (βαθμός 18,5).
35. Αριστείο και Βραβείο Προόδου Σχ. Έτους 2003 – 2004 (βαθμός 18,7).
36. 1^ο Βραβείο κληροδοτήματος Ι. Αλεξανδρή (Καλύτερη Σχ. έκθεση Δήμου Πηνειάς 2003), Ροδιά.

Συνέδρια

1. 72^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Ελληνικής Εταιρείας Βιοχημείας & Μοριακής Βιολογίας, Πάτρα (Ελλάδα), 2 – 4 Δεκεμβρίου, 2022.

- The role of the membrane androgen receptor OXER1 in androgen induced calcium changes.

(Αναρτημένη ερευνητική εργασία).

Athanasios A. Panagiotopoulos, Konstantina Kalyvianaki, Evangelia Konstantinou, George Notas, Elias Castanas and Marilena Kampa.

- Identification of specific antagonists for the membrane receptor of androgens, OXER1.

(Προφορική παρουσίαση ερευνητικής εργασίας).

Athanasios A. Panagiotopoulos, Konstantina Kalyvianaki, Evangelia Konstantinou, Stergios A. Pirintsos, George Notas, Elias Castanas and Marilena Kampa.

2. 9^ο Πανελλήνιο Forum Νέων Επιστημόνων Ελληνικής Εταιρείας Βιοχημείας & Μοριακής Βιολογίας, Πάτρα (Ελλάδα), 1 Δεκεμβρίου, 2022. Αναρτημένες ερευνητικές εργασίες.

- The role of the membrane androgen receptor OXER1 in androgen induced calcium changes.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Konstantina Kalyvianaki, Evangelia Konstantinou, George Notas, Elias Castanas and Marilena Kampa.

- Identification of specific antagonists for the membrane receptor of androgens, OXER1.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Konstantina Kalyvianaki, Evangelia Konstantinou, Stergios A. Pirintsos, George Notas, Elias Castanas and Marilena Kampa.

3. 13th International Meeting on Rapid Responses to Steroid Hormones (RRSH) 2022, Παρίσι (Γαλλία), 20-23 Σεπτεμβρίου, 2022. Αναρτημένη ερευνητική εργασία.

- The role of the membrane androgen receptor OXER1 in androgen induced calcium changes.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Konstantina Kalyvianaki, Evangelia Konstantinou, George Notas, Elias Castanas and Marilena Kampa.

4. The Steroid Hormones and Receptors in Health and Disease (12th RRSB), FASEB, 25-27 Μαΐου, 2021. Αναρτημένη ερευνητική εργασία.

- Testosterone and natural polyphenols are antagonists of OXER1- An *in silico* and *in vitro* approach.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Christina Papachristofi, Konstantina Kalyvianaki, Panagiotis Malamos, Panayiotis A. Theodoropoulos, George Notas, Theodora Calogeropoulou, Elias Castanas and Marilena Kampa.

5. 3. EFMC-ISMC & EFMC-YMCS Virtual Poster Session, 09 Σεπτεμβρίου 2020. Αναρτημένη ερευνητική εργασία.

- A simple open source bio-informatic methodology for initial exploration of GPCR ligands' agonistic/antagonistic properties.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Christina Papachristofi, Konstantina Kalyvianaki, Panagiotis Malamos, Panayiotis A. Theodoropoulos, George Notas, Theodora Calogeropoulou, Elias Castanas and Marilena Kampa.

6. 70^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Ελληνικής Εταιρείας Βιοχημείας & Μοριακής Βιολογίας, Αθήνα (Ελλάδα), 29 Νοεμβρίου – 1 Δεκεμβρίου, 2019. Αναρτημένη ερευνητική εργασία.

- Simulation of G_α proteins binding on GPCRs may predict ligands' agonistic/antagonistic properties.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Christina Papachristofi, Konstantina Kalyvianaki, Panagiotis Malamos, Panayiotis A. Theodoropoulos, George Notas, Theodora Calogeropoulou, Elias Castanas and Marilena Kampa.

7. 7^ο Πανελλήνιο Forum Νέων Επιστημόνων Ελληνικής Εταιρείας Βιοχημείας & Μοριακής Βιολογίας, Αθήνα (Ελλάδα), 28 Νοεμβρίου, 2019. Αναρτημένη ερευνητική εργασία.

- Simulation of G_α proteins binding on GPCRs may predict ligands' agonistic/antagonistic properties.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Christina Papachristofi, Konstantina Kalyvianaki, Panagiotis Malamos, Panayiotis A. Theodoropoulos, George Notas, Theodora Calogeropoulou, Elias Castanas and Marilena Kampa.

8. Συνέδριο Κλινικής & Μεταφραστικής Ογκολογίας 2019 – Ηράκλειο (Ελλάδα), 14 – 15 Νοεμβρίου, 2019.

9. Ε.Ε.Φ.Ι.Ε. 2019 «Η Ιατρική Ακρίβειας στη θεραπεία του καρκίνου & η Μονάδα Ιατρικής Ακρίβειας Κρήτης» - Ηράκλειο (Ελλάδα), 13 Μαρτίου, 2019.

10. 69^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Ελληνικής Εταιρείας Βιοχημείας & Μοριακής Βιολογίας, Λάρισα (Ελλάδα), 23 – 25 Νοεμβρίου, 2018. Αναρτημένες ερευνητικές εργασίες.

- An *in silico* method for the identification of nuclear localization signal of cargo proteins.

Athanasios. A. Panagiotopoulos, Chara Polioudaki, Sotirios. G. Ntallis, Dimitris Dellis, George Notas, Chistos. A. Panagiotidis, Panagiotis. A. Theodoropoulos, Elias Castanas and Marilena Kampa.

- Evidence for nuclear translocation of the membrane androgen receptor, OXER1.

Panagiotis Malamos, Athanasios. A. Panagiotopoulos, Konstantina Kalyvianaki, Chara Polioudaki, Panagiotis. A. Theodoropoulos, George Notas, Elias Castanas and Marilena Kampa.

- A comparative study of the membrane androgen receptors OXER1, GPRC6A and ZIP9.

Konstantina Kalyvianaki, Athanasios A. Panagiotopoulos, Panagiotis Malamos, Eleni Moustou, Maria Tzardi, Efstathios N. Stathopoulos, Georgios S. Ioannidis, Kostas Marias, George Notas, Panayiotis A. Theodoropoulos, Elias Castanas and Marilena Kampa.

11. 11th International Meeting on Rapid Responses to Steroid Hormones (RRSH) 2018, Δουβλίνο (Ιρλανδία), 04 – 06 Σεπτεμβρίου, 2018. Αναρτημένες ερευνητικές εργασίες.

- Evidence for nuclear translocation of the membrane androgen receptor, OXER1.

Athanasios. A. Panagiotopoulos, Panagiotis Malamos, Konstantina Kalyvianaki, Chara Polioudaki, Panagiotis. A. Theodoropoulos, George Notas, Elias Castanas and Marilena Kampa.

- A comparative study of the membrane androgen receptors OXER1, GPRC6A and ZIP9.

Konstantina Kalyvianaki, Athanasios A. Panagiotopoulos, Panagiotis Malamos, Eleni Moustou, Maria Tzardi, Efstathios N. Stathopoulos, Georgios S. Ioannidis, Kostas Marias, George Notas, Panayiotis

A. Theodoropoulos, Elias Castanas and Marilena Kampa.

12. 19^ο Συνέδριο Μεταπτυχιακών Φοιτητών Τμήματος Χημείας, Ηράκλειο (Ελλάδα), 02 – 04 Μαΐου, 2017. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Φωτοκαταλυτική παραγωγή H₂.

Aθανάσιος Α. Παναγιωτόπουλος και Αθανάσιος Γ. Κουτσολέλος.

13. EUROFILLERS POLYMER BLENDS 2017, Ηράκλειο (Ελλάδα), 23 – 27 Απριλίου, 2017.

14. 22^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, Θεσσαλονίκη (Ελλάδα), 02 – 04 Δεκεμβρίου, 2016. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας-Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Φωτοκαταλυτική παραγωγή H₂ με μεταλλοπορφυρίνες.

Aθανάσιος Α. Παναγιωτόπουλος και Αθανάσιος Γ. Κουτσολέλος.

15. Athens International Catalysis Symposium (AICS 2016), Αθήνα (Ελλάδα), 03–04 Νοεμβρίου, 2016. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Porphyrins and Cobaloximes: Molecular Photocatalytic Systems for Hydrogen Evolution.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Kalliopi Ladomenou, Dongyue Sun, Vincent Artero and Athanassios G. Coutsolelos.

16. The 2nd Israel-Greece Joint Meeting on Nanotechnology and Bionanoscience, Ηράκλειο (Ελλάδα), 25 – 27 Οκτωβρίου, 2016. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Porphyrin Pt as catalyst and porphyrin Pd as photosensitizer: a novel catalytic system for hydrogen evolution.

Athanasios A. Panagiotopoulos and Athanasios G. Coutsolelos.

17. "Organic & Perovskite Solar Cells Conference and MCWG Meetings of Cost Action MP1307", Ηράκλειο (Ελλάδα), 19–21 Οκτωβρίου, 2016. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Porphyrin Pt as catalyst and porphyrin Pd as photosensitizer: a novel catalytic system for hydrogen evolution.

Athanasios A. Panagiotopoulos and Athanasios G. Coutsolelos.

18. International Symposium: Chemistry at the Interface of Biology and Medicine, Ηράκλειο (Ελλάδα), 23 – 26 Σεπτεμβρίου, 2016.

19. COST Action CM1202-Supramolecular Photocatalytic Water Splitting in connection with a meeting of Working Groups 3 and 4 on the theme: Photoinduced charge transfer, separation, and accumulation, Milazzo (Ιταλία), 04 – 06 Σεπτεμβρίου, 2016. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Photocatalytic H₂ production with metalloporphyrins and cobaloximes.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Kalliopi Ladomenou, Dongyue Sun, Vincent Artero and Athanassios G. Coutsolelos.

- Photocatalytic hydrogen production based on a water-soluble porphyrin derivative as

sensitizer and a series of Wilkinson type complexes as catalysts.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Efthymios Fasoulakis, Eleutheria Vardalachaki and Athanassios G. Coutsolelos.

20. COST Action CM1202 Tarragona Training School and the Meeting of Working Groups 1 and 2, Tarragona (Ισπανία), 11 – 14 Απριλίου, 2016. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Photocatalytic H₂ production with metalloporphyrins.

Athanasios A. Panagiotopoulos and Athanassios G. Coutsolelos.

21. 18^ο Συνέδριο Μεταπτυχιακών Φοιτητών Τμήματος Χημείας, Ηράκλειο (Ελλάδα), 26 – 27 Μαρτίου, 2016. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Φωτοκαταλυτική παραγωγή H₂ με μεταλλοπορφυρίνες.

Αθανάσιος Α. Παναγιωτόπουλος και Αθανάσιος Γ. Κουτσολέλος.

22. Joint Working Group Meeting of WGs 3 and 4: Novel experimental and theoretical tools to describe the photophysics and photochemistry of supramolecular water splitting, Engelberg (Ελβετία), 27 – 29 Νοεμβρίου, 2015. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Porphyrins and Cobaloximes: Molecular Photocatalytic Systems for Hydrogen Evolution.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Kalliopi Ladomenou, Dongyue Sun, Vincent Artero and Athanassios G. Coutsolelos.

23. 2nd COST Action CM 1202 PERSPECT-H₂O Meeting: Hydrogen Production, Gdansk University of Technology (Πολωνία), 04 – 09 Σεπτεμβρίου, 2015. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Porphyrin Pt as catalyst and porphyrin Pd as photosensitizer: a novel catalytic system for hydrogen evolution.

Athanasios A. Panagiotopoulos and Athanassios G. Coutsolelos.

- The influence of the pyridine ligand on the sixth position of various cobaloximes on the photochemical H₂ production.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Kalliopi Ladomenou, Dongyue Sun, Vincent Artero and Athanassios G. Coutsolelos.

24. Solar Fuels: moving from materials to devices Early Career Researchers' Symposium, Imperial College, Λονδίνο (Ηνωμένο Βασίλειο), 06 Ιουλίου, 2015. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Porphyrin Pt as catalyst and porphyrin Pd as photosensitizer: a novel catalytic system for hydrogen evolution.

Athanasios A. Panagiotopoulos and Athanassios G. Coutsolelos.

- The influence of the pyridine ligand on the sixth position of various cobaloximes on the photochemical H₂ production.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Kalliopi Ladomenou, Dongyue Sun, Vincent Artero and Athanassios

G. Coutsolelos.

25. Solar Fuels: moving from materials to devices SFN International Discussion Meeting, Royal Society of Chemistry, Λονδίνο (Ηνωμένο Βασίλειο), 07 – 08 Ιουλίου, 2015. Παρουσίαση ερευνητικής εργασίας – Προσκεκλημένος Ομιλητής.

- Porphyrin Pt as catalyst and porphyrin Pd as photosensitizer: a novel catalytic system for hydrogen evolution.

Athanasios A. Panagiotopoulos and Athanasios G. Coutsolelos.

Συνδρομές

- Μέλος της Royal Society of Chemistry
- Μέλος της Ελληνικής Εταιρείας Φαρμακοχημείας
- Μέλος της European Federation for Medicinal Chemistry and Chemical Biology (EFMC-YSN)
- Μέλος της Ελληνικής Εταιρείας Βιοχημείας και Μοριακής Βιολογίας
- Reviewer στο διεθνές περιοδικό χημείας "*Macromolecules*"
- PRACE Support to Mitigate Impact Of COVID-19 Pandemic

Δημοσιεύσεις

Συνολικές Ετεροαναφορές: 214
h-Index: 7
h-10-Index: 6

1. Recognition motifs for Importin 4 (LPPRS(G/P)P) and Importin 5 (KP(K/Y)LV) binding, by bio-informatic simulation and experimental in vitro validation, Athanasios A. Panagiotopoulos*, Konstantina Kalyvianaki*, Paraskevi K. Tsodoulou, Maria N. Darivianaki, Dimitris Dellis, George Notas, Vangelis Daskalakis, Panayiotis A. Theodoropoulos, Christos A. Panagiotidis, Elias Castanas, Marilena Kampa, ***Computational and Structural Biotechnology Journal***, 2022, **20**, 5952-5961. doi: 10.1016/j.csbj.2022.10.015. *Equal contribution. IF: 7.271. Citations: 1.

2. Importins involved in the nuclear transportation of steroid hormone receptors: In silico and in vitro data, Konstantina Kalyvianaki*, Athanasios A. Panagiotopoulos*, Maria Patentalaki, Elias Castanas, Marilena Kampa, ***Frontiers in Endocrinology***, 2022, **13**, 954629. doi: 10.3389/fendo.2022.954629. *Equal contribution. IF: 3.675. Citations: 1.

3. From Traditional Ethnopharmacology to Modern Natural Drug Discovery: A Methodology Discussion and Specific Examples, Stergios Pirintsos, Athanasios A. Panagiotopoulos, Michalis Bariotakis, Vangelis Daskalakis, Christos Lionis, George Sourvinos, Ioannis Karakasiliotis, Marilena Kampa, Elias Castanas, ***Molecules***, 2022, **27** (13), 4060. doi: 10.3390/molecules27134060. PMID: 35807306. IF: 4.927.

4. OXER1 mediates testosterone-induced calcium responses in prostate cancer cells, Athanasios A. Panagiotopoulos, Konstantina Kalyvianaki, Burcin Serifoglou, Evangelia Konstantinou, George Notas, Elias Castanas, Marilena Kampa, ***Molecular and Cellular Endocrinology***, 2022, **539**, 111487. doi: 10.1016/j.mce.2021.111487. PMID: 34634385. IF: 4.102. Citations: 2.

5. Natural polyphenols inhibit the dimerization of the SARS-CoV-2 main protease: the case of fortunellin and its structural analogs, Athanasios A. Panagiotopoulos, Ioannis Karakasiliotis, Danaï-Maria Kotzampasi, Marios Dimitriou, George Sourvinos, Marilena Kampa, Stergios. A. Pirintsos, Elias Castanas, Vangelis Daskalakis, ***Molecules***, 2021, **26** (19), 6068.

doi: 10.3390/molecules26196068. PMID: 34641612. IF: 4.411. Citations: 7.

6. New Antagonists of the Membrane Androgen Receptor OXER1 from the ZINC Natural Product Database, Athanasios A. Panagiotopoulos, Konstantina Kalyvianaki, Stergios A. Pirintsos, George Notas, Elias Castanas, Marilena Kampa, **ACS Omega**, 2021, **6** (44), 29664–29674.

doi: 10.1021/acsomega.1c04027. PMID: 34778638. IF: 3.512. Citations: 5.

7. ER α 36–GPER1 Collaboration Inhibits TLR4/NF κ B-Induced Pro-Inflammatory Activity in Breast Cancer Cells, George Notas, Athanasios A. Panagiotopoulos, Rodanthe Vamvoukaki, Konstantina Kalyvianaki, Foteini Kiagiadaki, Alexandra Deli, Marilena Kampa, Elias Castanas, **International Journal of Molecular Sciences**, 2021, **22** (14), 7603.

doi: 10.3390/ijms22147603. PMID: 34299224. IF: 5.923. Citations: 3.

8. p-cymene impairs SARS-CoV-2 and Influenza A (H1N1) viral replication: *In silico* predicted interaction with SARS-CoV-2 nucleocapsid protein and H1N1 nucleoprotein, Athanasios A. Panagiotopoulos, Melpomeni Tseliou, Ioannis Karakasiliotis, Danai-Maria Kotzampasi, Vangelis Daskalakis, Nikolaos Kesesisidis, George Notas, Christos Lionis, Marilena Kampa, Stergios Pirintsos, George Sourvinos, Elias Castanas, **Pharmacology Research & Perspectives**, 2021, **9**:e00798, 1-12. doi: 10.1002/prp2.798. PMID: 34128351. IF: 2.590. Citations: 9.

9. The sequence [EKRKI(E/R)(K/L/R/S/T)] is a nuclear localization signal for importin 7 binding (NLS7), Athanasios A. Panagiotopoulos, Chara Polioudaki, Sotirios G. Ntallis, Dimitrios Dellis, George Notas, Christos A. Panagiotidis, Panagiotis A. Theodoropoulos, Elias Castanas, Marilena Kampa, **Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects**, 2021, **1865**, 5, 129851.

doi: 10.1016/j.bbagen.2021.129851. PMID: 33482249. IF: 3.670. Citations: 6.

10. The natural polyphenol fortunellin is a dimerization inhibitor of the SARS-CoV-2 3C-like proteinase, revealed by molecular simulations, Athanasios A. Panagiotopoulos, Danai-Maria Kotzampasi, George Sourvinos, Marilena Kampa, Stergios A. Pirintsos, Elias Castanas, Vangelis Daskalakis, **ARXIV**, 2020, (ARXIV: <https://arxiv.org/abs/2007.07736>). Citations: 2.

11. A simple open source bio-informatic methodology for initial exploration of GPCR ligands' agonistic/antagonistic properties, Athanasios A. Panagiotopoulos, Christina Papachristofi, Konstantina Kalyvianaki, Panagiotis Malamos, Panayiotis A. Theodoropoulos, George Notas, Theodora Calogeropoulou, Elias Castanas, Marilena Kampa, **Pharmacology Research & Perspectives**, 2020, **8**:e00600, 1-12.

doi: 10.1002/prp2.600. PMID: 32662237. IF: 2.590. Citations: 5.

12. Membrane androgen receptors (OXER1, GPRC6A AND ZIP9) in prostate and breast cancer: A comparative study of their expression, Konstantina Kalyvianaki, Athanasios A. Panagiotopoulos, Panagiotis Malamos, Eleni Moustou, Maria Tzardi, Efsthathios N. Stathopoulos, Georgios S. Ioannidis, Kostas Marias, George Notas, Panayiotis A. Theodoropoulos, Elias Castanas, Marilena Kampa, **Steroids**, 2019, **142**, 100-108.

doi: 10.1016/j.steroids.2019.01.006. PMID: 30707908. IF: 2.500. Citations: 25.

13. Eicosanoids in prostate cancer, Athanasios A. Panagiotopoulos, Konstantina Kalyvianaki, Elias Castanas, Marilena Kampa, **Cancer Metastasis Rev.**, 2018, **37**, 237-243.

doi: 10.1007/s10555-018-9750-0. PMID: 30078159. IF: 9.260. Citations: 15.

14. Photochemical hydrogen production and cobaloximes: influence of cobalt axial N-ligand on the system stability, Athanasios A. Panagiotopoulos, Kalliopi Ladomenou, Dongyue Sun, Vincent Artero, Athanassios G. Coutsolelos, *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 6732-6738.

doi: 10.1039/C5DT04502A. PMID: 26978600. IF: 4.390. Citations: 76.

15. Photochemical hydrogen evolution using Sn-porphyrin as photosensitizer and a series of Cobaloximes as catalysts, Georgios Landrou, Athanasios A. Panagiotopoulos, Kalliopi Ladomenou, Athanassios G. Coutsolelos, *J. Porphyrins Phthalocyanines*, 2016, **20**, 534-541.

doi: 10.1142/S1088424616500243. IF: 1.816. Citations: 17.

16. Photocatalytic hydrogen production based on a water-soluble porphyrin derivative as sensitizer and a series of Wilkinson type complexes as catalysts, Athanasios A. Panagiotopoulos, Efthymios Fasoulakis, Eleutheria Vardalachaki, Athanassios G. Coutsolelos, *J. Porphyrins Phthalocyanines*, 2016, **20**, 1-7. doi: 10.1142/S1088424616500905. IF: 1.618. Citations: 11.

17. Porphyrin Sensitized Evolution of Hydrogen using Dawson and Keplerate Polyoxometalate Photocatalysts, Athanasios A. Panagiotopoulos, Antonios Douvas, Panagiotis Argitis, Athanassios G. Coutsolelos, *ChemSusChem*, 2016, **22**, 3213-3219.

doi: 10.1002/cssc.201600995. PMID: 27775226. IF: 8.470. Citations: 29.

Πιστοποιήσεις

- Πιστοποιητικό ψηφιακών δεξιοτήτων της Google, 18/07/2017.
- Πιστοποίηση από το Εθνικό Δίκτυο Υποδομών Τεχνολογίας και Έρευνας για χρήση του υπερυπολογιστικού συστήματος Aris-GRNET.

Βιβλία Ελληνικά:

1. Αρχές Σχεδιασμού και Ανάπτυξης Νέων Φαρμάκων, Αθανάσιος Α. Παναγιωτόπουλος, Ευαγγελία Κ. Κωνσταντίνου και Ευθύμιος Γ. Φασουλάκης, *Ιατρικές Εκδόσεις Λίτσας*, 2021, αριθμός σελίδων: 176, Πανεπιστημιακό σύγγραμμα. ISBN: 978-960-372-230-4. Κωδικός βιβλίου στον Εύδοξο: 112698855.

2. Χημεία Φυσικών Προϊόντων, Αθανάσιος Α. Παναγιωτόπουλος και Ανδρέας Ν. Αθανασάκης, *Εκδόσεις Παπαζήση*, 2019, αριθμός σελίδων: 272, Πανεπιστημιακό σύγγραμμα. ISBN: 978-960-456-495-8, Κωδικός βιβλίου στον Εύδοξο: 86192610.

3. Αναλύσεις Κλινικής Χημείας, Αθανάσιος Α. Παναγιωτόπουλος, *Εκδόσεις Ζήτη*, 2017, αριθμός σελίδων: 320, Πανεπιστημιακό σύγγραμμα. ISBN: 978-960-456-495-8, Κωδικός βιβλίου στον Εύδοξο: 68402021.

4. Εργαστηριακές Ασκήσεις Βιοχημείας, Αθανάσιος Α. Παναγιωτόπουλος και Γεωργία Ν. Νικολακάκου, *Εκδόσεις Ζήτη*, **2017**, αριθμός σελίδων: 296, Πανεπιστημιακό σύγγραμμα. ISBN: 978-960-456-496-5, Κωδικός βιβλίου στον Εύδοξο: 68406178.

Ξερόγλωσσα:

1. Introduction to enzymes and biotechnology, Athanasios A. Panagiotopoulos and Efthymios G. Fasoulakis, *Lambert Academic Publishing*, **2017**, number of pages: 68, University textbook. ISBN: 978-620-2-02486-0, EAN: 9786202024860.

2. Exercises For Biochemistry Laboratory I, Athanasios A. Panagiotopoulos, Georgia N. Nikolakakou and Efthymios G. Fasoulakis, *Lambert Academic Publishing*, **2017**, number of pages: 141, University textbook. ISBN: 978-3-659-63944-9, EAN: 9783659639449.

3. Exercises For Biochemistry Laboratory II, Athanasios A. Panagiotopoulos, Georgia N. Nikolakakou and Efthymios G. Fasoulakis, *Lambert Academic Publishing*, **2017**, number of pages: 145, University textbook. ISBN: 978-620-2-06036-3, EAN: 978620206036-3.

4. Exercises For Biochemistry Laboratory III, Athanasios A. Panagiotopoulos, Georgia N. Nikolakakou and Efthymios G. Fasoulakis, *Lambert Academic Publishing*, **2017**, number of pages: 156, University textbook. ISBN: 978-3-8454-3997-6, EAN: 9783845439976.

Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας

- Para-cymene analogues as anti-virals, GR-22-0002175198, UK-2002141.6, RF: 93.84.142364/01.
- Compounds useful as anti-viral agents, US-177799,055, PCT/EP2021/053389.

Διαδικτυακά Σεμινάρια

1. Ligand-Based Drug Design and SAR Analysis, 22 Ιουνίου, 2020.

- MOEsaic / R-Group Profiles and Analysis / MMP Analysis / Similarity and Substructure Searching / Descriptor Calculations / Conformational Searching / Molecular Alignments / Pharmacophore Modeling and Searching.

2. Developability Assessment and Property Prediction by pH-Dependent Conformational Sampling, 23 Ιουνίου, 2020.

- Antibody Modeling / Developability Assessment / Solubility and Aggregation Prediction / Titration, pI, and pKa Calculation.

3. Organizing Protein Structural Families and Data Mining, 24 Ιουνίου, 2020.

- Moe Project / Specialized Protein Families / Project Search / Organizing and Centralizing Project Data / Protein Family Modeling.

4. Small Molecule Virtual Screening, 24 Ιουνίου, 2020.

- MOE Databases / Descriptors / Fingerprints / QSPR Modeling / Pharmacophore Modeling / Template-Forced Docking / Scaffold Replacement / MedChem Transformations.

5. Computational Modeling of PROTAC-Mediated Ternary Complexes: Applications and Insight, 25 Ιουνίου, 2020.

- PROTAC / Targeted Protein Degradation / Ternary Complexes / Protein-Protein Docking.

6. Cheminformatics and QSAR, 25 Ιουνίου, 2020.

- MOE databases / Calculated Descriptors / Fingerprints / QSAR Modeling / Binary QSAR / Similarity Searching / Consensus Modeling.

7. Biologics: Protein Alignments, Modeling and Docking, 26 Ιουνίου, 2020.

- Protein Alignments and Superposition / Loop and Linker Modeling / Homology Modeling / Protein-Protein Docking / Protein Solubility Analysis / 2D Hot Spot Mapping / PLIF / Biologics QSAR Modeling.

8. Developability Assessment and Property Prediction by pH-Dependent Conformational Sampling, 07 Ιουλίου, 2020.

- Antibody Modeling / Developability Assessment / Solubility and Aggregation Prediction / Titration, pI, and pKa Calculation.

9. Computational Modeling of PROTAC-Mediated Ternary Complexes: Applications and Insight, 08 Ιουλίου, 2020.

- PROTAC / Targeted Protein Degradation / Ternary Complexes / Protein-Protein Docking.

10. Peptide Modeling, Conformational Searching and Docking, 09 Ιουλίου, 2020.

- Structure preparation / Non-natural amino acids / Conformational searching / Distance restraints / Peptide-protein docking / Protein-ligand interaction fingerprints.

11. Antibody Modeling and Protein Engineering, 05 Αυγούστου, 2020.

- Protein Engineering / Protein Properties / Developability / Hot Spot Analysis / Antibody Modeling / Humanization / Molecular Surfaces.

12. Organizing Protein Structural Families and Data Mining, 06 Αυγούστου, 2020.

- Moe Project / Specialized Protein Families / Project Search / Organizing and Centralizing Project Data / Protein Family Modeling.

13. Peptide Modeling, Conformational Searching and Docking, 07 Αυγούστου, 2020.

- Structure preparation / Non-natural amino acids / Conformational searching / Distance restraints / Peptide-protein docking / Protein-ligand interaction fingerprints.

14. Drug Development Complemented: COSMO-RS Applications to Solubility & Cocrystals Confirmation, 03 Σεπτεμβρίου, 2020.

- Recent COSMO-RS applications in the context of rational drug development.

15. 31th Πανελλήνιο e-Συνέδριο Νευρολογίας, 03 – 06 Σεπτεμβρίου, 2020.**16. EFMC-ISMC First Time Disclosures & Late Breaking News, 07 – 08 Σεπτεμβρίου, 2020.****17. EFMC-ISMC & EFMC-YMCS Virtual Poster Session, 09 Σεπτεμβρίου, 2020.**

- A simple open source bio-informatic methodology for initial exploration of GPCR ligands' agonistic/antagonistic properties.

Athanasios A. Panagiotopoulos, Christina Papachristofi, Konstantina Kalyvianaki, Panagiotis Malamos, Panayiotis A. Theodoropoulos, George Notas, Theodora Calogeropoulou, Elias Castanas and Marilena Kampa.

18. Virtual 7th EFMC Young Medicinal Chemists' Symposium, 10 – 11 Σεπτεμβρίου, 2020.**19. 15th Meeting of the European Association of Neuro-Oncology (EANO), 09 – 13 Σεπτεμβρίου, 2020.****20. Cryo-EM for Drug Discovery: Recent scientific results and practical considerations, Thermo Fisher Scientific, 29 Σεπτεμβρίου, 2020.****21. 4th EFMC-YSN MedChemBioOnline, 29 Σεπτεμβρίου, 2020.****22. 1st MercachemSyncom Digital Conference, 07 – 08 Οκτωβρίου, 2020.****23. Exploring New Modality Space by Precision Chemistry, 07 – 08 Οκτωβρίου, 2020.**

- Recent advances in the new modality space, including targeted delivery, conjugates and molecular glues.

24. Solvent Analysis for Lead Optimization, 13 Οκτωβρίου, 2020.

- Solvent Analysis / 3D-RISM / Lead Optimization / Water Placement.

25. Protein Alignments and Homology Modeling, 14 Οκτωβρίου, 2020.

- Homology Modeling / Loop Modeling / Loop Conformational Searching / Sequence Alignments / Structure Superposition / Multimer Alignments and Superpositions.

26. Combinatorial Library Enumeration for Structure-Based Drug Design, 15 Οκτωβρίου, 2020.

- Fragment Libraries / Reaction Databases / Library Enumeration / Pharmacophore Filters / Structure-Based Drug Design.

27. Protein-Protein Docking and Epitope Analysis, 20 Οκτωβρίου, 2020.

- Protein-Protein Docking / Molecular Surfaces / Protein Patches / Interaction Fingerprints / Clustering / Epitope Analysis.

28. In Silico Fragment-Based Drug Design: Approaches and Applications, 21 Οκτωβρίου, 2020.

- Scaffold Replacement / Fragment Linking / R-Group Screening / Medicinal Chemistry Transformations / Fragment Libraries / Pharmacophore Models.

29. Applications of Pharmacophores in Drug Design, 22 Οκτωβρίου, 2020.

- Pharmacophore Modeling / Pharmacophore Consensus / Flexible Alignments / Pharmacophore Searching / Protein-Ligand Interaction Fingerprints (PLIF).

30. Structure-Based Drug Design and Ligand Modification, 27 Οκτωβρίου, 2020.

- Molecular Surfaces and Maps / Ligand Interactions / Docking / Ligand Optimization / Ligand Selectivity / Protein Alignments and Superposition.

31. Creating and Analyzing Focused Mutant Libraries for Protein Engineering, 28 Οκτωβρίου, 2020.

- Inputting Multiple Sequence Data / Mutation Frequencies / Targeted Mutant Libraries / Protein Engineering.

32. Revealing Conformational Behavior in Solution through NMR Data Analysis, 29 Οκτωβρίου, 2020.

- Conformer Generation / LowModeMD / QM Refinement / Solution Conformer Distribution.

33. Mining of Biomolecular Data Through an Intuitive Web-Based Platform, 04 Νοεμβρίου, 2020.

- PSILO / Macromolecular repository / 3D query searching / Pocket similarity / Display electron density / Central repository / Specialized protein databases.

34. Reverse Fingerprints (I): Application to Structural Motif Detection and Atomic Activity Contributions, 05 Νοεμβρίου, 2020.

- Molecular Fingerprints / Structural Motif Detection / Pharmacophores / Toxicology / Fingerprint Bit Score Visualization.

35. Reverse Fingerprints (II): Fingerprints to Pharmacophore Queries, 11 Νοεμβρίου, 2020.

- Molecular Fingerprints / Consensus Models / Pharmacophore Elucidation / 3D Query Generation.

36. Mining Activity Data to Guide a Medicinal Chemistry Campaign, 12 Νοεμβρίου, 2020.

- MOEsaic / Activity Data Mining / SAR / Matched Molecular Pairs / R-group Analysis / R-group Profiling / Free-Wilson Analysis / Compound Suggestions.

37. Protein-Protein Docking and Epitope Analysis, 17 Νοεμβρίου, 2020.

- Protein-Protein Docking / Molecular Surfaces / Protein Patches / Interaction Fingerprints / Clustering / Epitope Analysis.

38. Protein Engineering and Affinity Modeling, 18 Νοεμβρίου, 2020.

- Protein Engineering / Protein Properties / Developability / Hot Spot Analysis.

39. Antibody Modeling and Developability, 19 Νοεμβρίου, 2020.

- Protein Annotation / Protein Patches / Virtual Mutagenesis / Antibody Homology Modeling / Protein Properties / Developability.

40. Applications of Pharmacophores in Drug Design, 23 Νοεμβρίου, 2020.

-Pharmacophore Modeling / Pharmacophore Consensus / Flexible Alignments / Pharmacophore Searching / Protein-Ligand Interaction Fingerprints (PLIF).

41. Biologics: Protein Alignments, Modeling and Docking, 24 Νοεμβρίου, 2020.

- Protein Alignments and Superposition / Loop and Linker Modeling / Homology Modeling / Protein-Protein Docking.

42. 5th EFMC-YSN MedChemBioOnline, Artificial Intelligence applied to Medicinal Chemistry, 25 Νοεμβρίου, 2020.**43. Application of Docking and Fragment Replacement to Structure-Based Drug Design, 25 Νοεμβρίου, 2020.**

- Docking / Pharmacophore Modeling / Fragment-Based Design / Scaffold Replacement / Protein-Ligand Interaction Fingerprints (PLIF).

44. Creating and Analyzing Focused Mutant Libraries for Protein Engineering, 08 Δεκεμβρίου, 2020.

- Inputting Multiple Sequence Data / Mutation Frequencies / Targeted Mutant Libraries / Protein Engineering.

45. From Structure to Dynamics Simulation: Workflow for Preparing, Running and Visualizing MD Trajectories, 09 Δεκεμβρίου, 2020.

- Structure Preparation / Force Field / Solvation / AMBER / NAMD / Visualization / Player.

46. Advanced Small Molecule Docking, 10 Δεκεμβρίου, 2020.

-Structure Preparation / Protein Binding Site Visualization / Template-Based Docking / Covalent Docking / Pharmacophores / Protein-Ligand Interaction Fingerprints (PLIF) / Multiple Processor Calculations.

47. EFMC-Trends in Medicinal Chemistry Online Symposia (TIMCOS), 10 Δεκεμβρίου, 2020.**48. 7th Πανελλήνιο Συνέδριο της Ελληνικής Ακαδημίας Νευρο-ανοσολογίας, 10 – 13 Δεκεμβρίου, 2020.****49. In Silico Fragment-Based Drug Design: Approaches and Applications, 16 Δεκεμβρίου, 2020.**

- Scaffold Replacement / Fragment Linking / R-Group Screening / Medicinal Chemistry Transformations / Fragment Libraries / Pharmacophore Models.

50. Biologics by Design (CCG – MOE), 28 Ιανουαρίου, 2021.**51. Remote Control of G Protein-Coupled Receptor Function from the Extracellular Vestibule, BioSolveIT, 15 Απριλίου, 2021.**

51. Practical Guide: Set Up MOE High-Performance Computing on AWS Cloud, 20 Απριλίου, 2021.

- Webinar / Cloud / AWS / HPC / High-Throughput Screening / Large Scale Calculations / SLURM / Amazon Cluster.

52. DrugSpace Symposium — Last Call and Speaker Line-Up, BioSolveIT, 21 – 22 Απριλίου, 2021.**53. Solvent Analysis for Lead Optimization, 21 Απριλίου, 2021.**

- Webinar / Solvent Analysis / 3D-RISM / Lead Optimization / Water Placement.

54. Quantitative Predictions of Protein Solubility Using a QSPR Approach, 22 Απριλίου, 2021.

- Virtual Workshop / Homology Modeling / Protein Properties Calculations / QSAR/QSPR Modeling / Protein Patch Analysis.

55. UGM & Conference 2021, 19 – 20 Μαΐου, 2021.

- MOE / Biological Therapeutics / Protein Modelling / Protein Engineering / Small Molecule / SBDD / LBDD / FBDD / Computational Chemistry / Medicinal Chemistry / Cheminformatics / Drug Discovery.

56. Influencing Gai/s protein Activity by Peptidic Guanine Nucleotide Exchange Modulators, BioSolveIT, 15 Απριλίου, 2021.**57. 7th EFMC-YSN MedChemBioOnline, 25 Μαΐου, 2021.**

- Epigenetics: The Road Towards a Polypharmacological Approach.

58. 1st Edleris Symposium on Affinity Selection-Mass Spectrometry in Drug Discovery, 02 – 03 Ιουνίου, 2021.

- High throughput approach technology for successful Hit generation in drug discovery.

59. Biologics: Protein Alignments, Modeling and Docking, 15 Ιουνίου, 2021.

- Virtual Workshop / Protein Alignments and Superposition / Loop and Linker Modeling / Homology Modeling / Protein- Protein Docking.

60. The Application of Docking and Fragment Replacement to Structure-Based Drug Design, 16 Ιουνίου, 2021.

- Webinar / Docking / Pharmacophore Modeling / Fragment-Based Design / Scaffold Replacement / Protein-Ligand Interaction Fingerprints (PLIF).

61. In Silico Fragment-Based Drug Design: Approaches and Applications, 17 Ιουνίου, 2021.

- Webinar / Scaffold Replacement / Fragment Linking / Ligand Growing / R-Group Screening / Medicinal Chemistry Transformations / Combinatorial Fragment Libraries / Pharmacophore Models / Fragment Databases.

62. European Symposium on Organic Chemistry (ESOC 2021), Virtual Mini Symposium, 05 – 06 Ιουλίου, 2021.

63. Predicting CYP Selectivity, Reactivity, and Sites of Metabolism, 17 Αυγούστου, 2021.

- Cytochrome P450 (CYP) / Oxidative Metabolism / Small Molecule Liabilities / Pharmacophore Modeling.

64. Protein Engineering and Affinity Modeling, 18 Αυγούστου, 2021.

- Protein Engineering / Protein Properties / Developability / Hot Spot Analysis.

65. Kinase Protein Family Searching and Molecular Docking, 19 Αυγούστου, 2021.

- Protein Family Databases / Database Mining / Protein Annotations / Pharmacophore Modeling / Docking / Protein-Ligand Interaction Fingerprints (PLIF) / MOE Project / Kinase Proteins.

66. Structure Refinement Using Electron Density and Solvent Analysis, 31 Αυγούστου, 2021.

- Structure Preparation / Sidechain Rotamer Exploration / Electron Density Maps / X-Ray / CryoEM / Solvent Analysis with 3D-RISM.

67. Ligand-Based Drug Design and SAR Analysis, 01 Σεπτεμβρίου, 2021.

- MOEsaic / R-Group Profiles and Analysis / MMP Analysis / Similarity and Substructure Searching / Descriptor Calculations / Conformational Searching / Molecular Alignments / Pharmacophore Modeling and Searching.

68. Protein Alignments and Homology Modeling for Biologics, 02 Σεπτεμβρίου, 2021.

- Alignments and Superposition / Loop and Linker Modeling / Homology Modeling.

69. Receptor Pocket Similarity, 09 Σεπτεμβρίου, 2021.

- Pocket Similarity / Pocket Search / Protein Families / Alpha Carbons / PLB score / Druggable Sites.

70. High-Throughput Screening with MOE, 16 Σεπτεμβρίου, 2021.

- Cloud / HPC / High-Throughput Screening / Large Scale Calculations / Protein Alignments and Superposition / Loop and Linker Modeling / Homology Modeling / Protein-Protein Docking / Small molecule Docking / Pharmacophore Modeling / Fragment-Based.

71. EuroQSAR 2021 “European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationship”, 22 Σεπτεμβρίου, 2021.

- Virtual Screening Compound Libraries / Descriptors / QSAR / Drug Discovery.

72. UGM & Conference 2021, 22 – 23 Σεπτεμβρίου, 2021.

- MOE / Biological Therapeutics / Protein Modelling / Protein Engineering / Small Molecule / SBDD / LBDD / FBDD / Computational Chemistry / Medicinal Chemistry / Cheminformatics / Drug Discovery.

73. Small Molecule Virtual Screening, 05 Οκτωβρίου, 2021.

- Virtual Screening Compound Libraries / Descriptors, Fingerprints and QSPR Modeling / Pharmacophore Modeling / Template-based Docking / Compound Design.

74. Antibody Modeling and Developability, 06 Οκτωβρίου, 2021.

- Protein Annotation / Protein Patches / Virtual Mutagenesis / Antibody Homology Modeling / Protein Properties / Developability.

75. PSILO, 07 Οκτωβρίου, 2021.

- Macromolecular Repository / 3D Query Searching / Pocket Similarity / Display Electron Density / Central Repository / Specialized Protein Databases.

76. 2nd Symeres Precision Chemistry Conference “ Tools for Molecular Recognition and Diagnostics”, 12 – 13 Οκτωβρίου, 2021.

- Macromolecular Repository / Pocket Similarity / Display Electron Density / Central Repository / Virtual Mutagenesis.

77. SPICA 2021 “The Importance of Chromatography in the Development of Vaccines”, 14 Οκτωβρίου, 2021.

- MOE databases / Virtual Mutagenesis / Antibody Homology Modeling / Protein Properties / Developability.

78. Cheminformatics and QSAR, 19 Οκτωβρίου, 2021.

- MOE databases / Calculated Descriptors / Fingerprints / QSAR Modeling / Binary QSAR / Similarity Searching / Consensus Modeling.

79. Quantitative Predictions of Protein Solubility Using a QSPR Approach, 20 Οκτωβρίου, 2021.

- Homology Modeling / Protein Properties Calculations / QSAR/QSPR Modeling / Protein Patch Analysis.

80. Peptide Modeling and Docking, 21 Οκτωβρίου, 2021.

- Structure Preparation / Protein-Peptide Interaction Analysis / Conformational Searching / Protein-Peptide Docking / Protein-Ligand Interaction Fingerprints.

81. Structure-Based Drug Design and Ligand Modification, 02 Νοεμβρίου, 2021.

- Molecular Surfaces and Maps / Ligand Interactions / Docking / Ligand Optimization / Ligand Selectivity / Protein Alignments and Superposition.

82. Protein-Protein Docking and Epitope Analysis, 03 Νοεμβρίου, 2021.

- Protein-Protein Docking / Molecular Surfaces / Protein Patches / Interaction Fingerprints / Clustering / Epitope Analysis.

83. Reverse Fingerprints IV: Application to Motif Detection and Pharmacophore Query Generation, 04 Νοεμβρίου, 2021.

- Molecular Fingerprints / Structural Motif Detection / Pharmacophore Queries / Fingerprint Bit Visualization.

84. Free Energy Calculations with Thermodynamic Integration in MOE using AMBER, 16 Νοεμβρίου, 2021.

- Thermodynamic Integration / Free Energy Calculation / FEP / AMBER / Binding Affinity.

85. Developability Assessment and Property Prediction by pH-Dependent Conformational Sampling, 17 Νοεμβρίου, 2021.

- Antibody Modeling / Developability Assessment / Solubility and Aggregation Prediction / Titration, pI, and pKa Calculation.

86. Modeling PROTAC-Mediated Targeted Protein Degradation: Case Studies and Recent Developments, 18 Νοεμβρίου, 2021.

- Targeted Protein Degradation / PROTACs / Ternary Complex Modeling / Protein-Protein Docking.

87. From Structure to Dynamics Simulation: Workflow for Preparing, Running and Visualizing MD Trajectories, 30 Νοεμβρίου, 2021.

- Structure Preparation / Force Field / Solvation / AMBER / NAMD / Visualization / Player.

88. MOEsaic: Mining Activity Data to Guide a Medicinal Chemistry Campaign, 01 Δεκεμβρίου, 2021.

- Activity Data Mining / SAR / Matched Molecular Pairs / R-group Analysis / R-group Profiling / Free-Wilson Analysis / Compound Suggestions.

89. Protein Surface Charge and Hydrophobic Patch Analysis, 02 Δεκεμβρίου, 2021.

- Protein Patch Analysis / Protein Interaction Hot Spots / Antibodies and Related Derivatives / Interaction Sites / 2D Patch Depiction / Comparative Analysis / Key Active Regions.

90. Structure-Based Molecular Transformations, 09 Δεκεμβρίου, 2021.

- Medicinal Chemistry Transformations / Bioisosteres / Lead Optimization / Ligand Ranking and Scoring / Structure-Based Design / Ligand Synthetic Accessibility.

91. Introduction to PSILO, 25 Ιανουαρίου, 2022.

- Macromolecular Repository / 3D Query Searching / Pocket Similarity / Display Electron Density / Central Repository / Specialized Protein Databases.

92. Protein Alignments and Homology Modeling for Biologics, 26 Ιανουαρίου, 2022.

- Alignments and Superposition / Loop and Linker Modeling / Homology Modeling.

93. Fragment-Based Drug Design: Scaffold Replacement, Fragment Linking, R-Group Exploration and Bioisosteric Replacements, 27 Ιανουαρίου, 2022.

- Scaffold Hopping / Fragment Linking / Ligand Growing / R-Group Screening / Medicinal Chemistry Transformations / Pharmacophores / Fragment Databases.

94. Using Structures from Cryo Electron Microscopy for Drug Design, 03 Φεβρουαρίου, 2022.

- MOE / Cryo Electron Microscopy / Structure Preparation / Protonate3D / Electron Density / Protein Geometry.

95. Structure-Based Molecular Transformations, 09 Φεβρουαρίου, 2022.

- Medicinal Chemistry Transformations / Bioisosteres / Lead Optimization / Ligand Ranking and Scoring / Structure-Based Design / Ligand Synthetic Accessibility.

96. Template-Guided Docking of Small Molecules to Explore R-Group Substitutions, 10 Φεβρουαρίου, 2022.

- Docking / Template Setup / Sketcher Integration / SMARTS Matches / Wildcards / SAR Analysis / Kinase Database Mining / Structure Preparation / Pharmacophores.

97. Modeling PROTAC-Mediated Targeted Protein Degradation: Case Studies and Recent Developments, 22 Φεβρουαρίου, 2022.

- Targeted Protein Degradation / PROTACs / Ternary Complex Modeling / Protein-Protein Docking.

98. Biologics By Design 2022 Symposium, 24 Φεβρουαρίου, 2022.

- Biological Therapeutics / Protein Modelling / Protein Engineering / Antibody Modelling / Developability.

99. Protein Surface Charge and Hydrophobic Patch Analysis, 15 March, 2022.

- Protein Patch Analysis / Protein Interaction Hot Spots / Antibodies and Related Derivatives / Interaction Sites / 2D Patch Depiction / Comparative Analysis / Key Active Regions.

100. Molecular Modeling in the Cloud: A Turnkey Solution for Scalable Simulations, 16 March, 2022.

- MOE / Molecular modeling / Cloud / PROTACs / Protein Degradation / Virtual Screening.

101. MOEsaic: Mining Activity Data to Guide a Medicinal Chemistry Campaign, 17 March, 2022.

- Activity Data Mining / SAR / Matched Molecular Pairs / R-group Analysis / R-group Profiling / Free-Wilson Analysis / Compound Suggestions.

102. Antibody Modeling and Developability Assessment, 24 March, 2022.

- Antibody Modeling / Developability / Liability / Aggregation.

103. Kinase Protein Family Searching and Molecular Docking, 05 Απριλίου, 2022.

- Protein Family Databases / Database Mining / Protein Annotations / Pharmacophore Modeling /

Docking / Protein-Ligand Interaction Fingerprints (PLIF) / MOE Project / Kinase Proteins.

104. Reverse Fingerprints (IV): Application to Motif Detection and Pharmacophore Query Generation, 06 Απριλίου, 2022.

- Molecular Fingerprints / Structural Motif Detection / Pharmacophore Queries / Fingerprint Bit Visualization.

105. Easily Access, Analyze, and Manage AlphaFold Structures in PSILO, 07 Απριλίου, 2022.

- PSILO / AlphaFold Structures / Macromolecular Repository / Visualization / Pocket Similarity / Specialized Protein Databases.

106. Fragment-Based Drug Design: Scaffold Replacement, Fragment Linking, R-Group Exploration and Bioisosteric Replacements, 19 Απριλίου, 2022.

- Scaffold Hopping / Fragment Linking / Ligand Growing / R-Group Screening / Medicinal Chemistry Transformations / Pharmacophores / Fragment Databases.

107. Peptide Modeling and Docking, 20 Απριλίου, 2022.

- Structure Preparation / Protein-Peptide Interaction Analysis / Conformational Searching / Protein-Peptide Docking / Protein-Ligand Interaction Fingerprints.

108. Molecular Visualization and Publication-Quality Graphics in MOE, 21 Απριλίου, 2022.

- Molecular Graphics / Visual Effects / Publication-Quality Images.

109. Easily Access, Analyze, and Manage AlphaFold Structures in PSILO, 05 Μαΐου, 2022.

- PSILO / AlphaFold Structures / Macromolecular Repository / Visualization / Pocket Similarity / Specialized Protein Databases.

110. Molecular Visualization and Publication-Quality Graphics in MOE, 18 Αυγούστου, 2022.

- Molecular Graphics / Visual Effects / Publication-Quality Images.

111. Database AutoPH4: Pharmacophore Analysis of Multiple Protein Structures, 31 Αυγούστου, 2022.

- Automated Pharmacophore Generation / Binding Site Analysis / Protein Ensembles.

112. New and Enhanced Features in MOE 2022.02, 14 Σεπτεμβρίου, 2022.

- Combinatorial Library Enumeration / MOEsaic Docking Calculations / scFv and Custom Antibody Homology Models / GPU-Acceleration / Hydrogen Mass Repartitioning / Molecular Dynamics / Thermodynamic Integration / Database Viewer Enhancements.

113. Antibody Modeling and Developability Assessment, 15 Σεπτεμβρίου, 2022.

- Antibody Modeling / Developability / Liability / Aggregation.

114. New and Enhanced Features in Biologics in MOE 2022.02, 29 Σεπτεμβρίου, 2022.

- scFv and Custom Antibody Homology Models / GPU-Acceleration / Hydrogen Mass Repartitioning / Database Viewer Enhancements.

115. Easily Access, Analyze, and Manage AlphaFold Structures in PSILO, 20 Οκτωβρίου, 2022.

- PSILO / AlphaFold Structures / Macromolecular Repository / Pocket Similarity / Specialized Protein Databases / Visualization.

116. MOE Database Viewer: Advanced Molecular and Data Visualization, 27 Οκτωβρίου, 2022.

- Database Viewer / 2D, 3D, Carbohydrate and Sequence Displays / Plotting / Range and Rule-based Coloring / Images and Graphic Objects.

117. Template-Guided Docking of Small Molecules to Explore R-Group Substitutions, 17 Νοεμβρίου, 2022.

- Docking / Template Setup / Sketcher Integration / SMARTS Matches / Wildcards / SAR Analysis / Kinase Database Mining / Structure Preparation / Pharmacophores.

118. Introducing CLE: An Interactive Web-Based Combinatorial Library Enumerator, 30 Νοεμβρίου, 2022.

- Combinatorial Library Enumeration / Reaction Sketching / Reagent and Product Filtering / Simple and Multicomponent Reactions.

119. Structure-Based Charge Calculations for Predicting Properties and Profiling Antibody Therapeutics, 14 Δεκεμβρίου, 2022.

- Antibody Modeling / Developability / Aggregation / Viscosity / Clearance.