

**Όνομα :** Βασιλική Θ. Σκαμνάκη  
**Ημερ. γέννησης:** 3 Δεκεμβρίου 1971  
**Τόπος γέννησης:** Αθήνα  
**Υπηκοότητα:** Ελληνική  
**Διεύθυνση εργασίας:** Τμήμα Βιοχημείας και Βιοτεχνολογίας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας  
Πλούτωνος 26 & Αιόλου, Λαρίσα 41221.  
**E-mail:** [vskamnaki@eie.gr](mailto:vskamnaki@eie.gr), [vskamnaki@bio.uth.gr](mailto:vskamnaki@bio.uth.gr)  
**Τηλ:** +30 2410 565297

## Εκπαίδευση

---

### Εγκύκλιες σπουδές:

**1989:** Απολυτήριο Λυκείου (1<sup>ο</sup> Λύκειο Ζακύνθου)  
**1992:** General Certificate of Education A Level (Epping Forest College, Loughton, Essex, UK)

### Προπτυχιακή εκπαίδευση:

**1995:** Πτυχίο Βιοχημείας (BSc Hons), Τμήμα Βιοχημείας και Μοριακής Βιολογίας, University College London, Πανεπιστήμιο του Λονδίνου.

### Μεταπτυχιακή εκπαίδευση:

2002: Διδακτορική Διατριβή, Τμήμα Βιολογίας, Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών.  
Τίτλος διδακτορικής διατριβής "Κίνηση της γλυκογονικής φωσφορυλάσης: Σχέσεις δομής και βιολογικού ρόλου. Κινητικές και κρυσταλλογραφικές μελέτες".

**Ξένες Γλώσσες:** Αγγλικά, Γαλλικά

## Ερευνητική-Διδακτική Εμπειρία

---

**Ιούλιος 2012:** Επισκέπτρια Καθηγήτρια στο Pierre and Marie Curie University of Paris 6, Sorbonne Universities.

**Ιούνιος 2010:** Εκλογή Λέκτορα στο Τμήμα Βιοχημείας και Βιοτεχνολογίας, Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, με γνωστικό αντικείμενο Βιοχημεία-Μεταβολισμός (εκκρεμής διορισμός).

**2009- 2012:** Μεταδιδακτορική ερευνήτρια στο Ινστιτούτο Οργανικής και Φαρμακευτικής Χημείας του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών. (Εργαστήριο Δομικής Βιολογίας και Χημείας).

**2007-2008 :** Επιστημονικός συνεργάτης στο Ινστιτούτο Βιολογίας ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος (επ.υπεύθυνοι Φ. Τσιλιμπρη-Α.Χρόνη)

**2006:** Μεταδιδακτορική ερευνήτρια στο Ινστιτούτο Οργανικής και Φαρμακευτικής Χημείας του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών (επ.ομάδα Δρ. Ν. Οικονομάκου).

**2002-2006:** Μεταδιδακτορική ερευνήτρια στο Εργαστήριο Μοριακής Βιοφυσικής του Τμήματος Βιοχημείας του Πανεπιστημίου της Οξφόρδης (επ.ομάδα της Prof. Dame Louise. N. Johnson).

**1995-2001:** Επιστημονικός συνεργάτης στο Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών στο Ινστιτούτο Βιολογικών Ερευνών και Βιοτεχνολογίας (επ.ομάδα Δρ. Ν. Οικονομάκου) .

## Εμπειρία σε εργαστηριακές τεχνικές

---

- Κλωνοποίηση και ανάλυση DNA (ενσωμάτωση DNA σε πλασμιδιακούς φορείς, απομόνωση και καθαρισμός πλασμιδιακών φορέων, μετασχηματισμός βακτηριδιακών στελεχών).
- Απομόνωση και έκφραση πρωτεϊνών (από ιστό, έκφραση πρωτεϊνών σε προκαρυωτικά και ευκαρυωτικά συστήματα-baculovirus mediated protein expression in insect cells).
- Καθαρισμός πρωτεϊνών (χρωματογραφικές μέθοδοι- χρήση συστημάτων χρωματογραφίας AKTA FPLC/HPLC,)

- Πρωτεϊνική ανάλυση (ενζυμική κινητική, ηλεκτροφόρηση SDS-πολυακρυλαμίδης, αποτύπωση κατά Western, μελέτες φασματοσκοπίας.)
- Προσδιορισμός ενζυμικής δραστηριότητας (βιοχημικά assays). Μελέτες ενζυμικής κινητικής.
- Κρυστάλλωση πρωτεϊνών (τεχνικές μικροδιαπίδωσης, διάχυσης ατμών κρεμάμενης/καθήμενης σταγόνας, κ.ά.)
- Συλλογή κρυσταλλογραφικών δεδομένων με ακτίνες Χ με χρήση πηγών συγχροτρονικής ακτινοβολίας (synchrotron) και συμβατικών πηγών-κρυσκοπικές μέθοδοι συλλογής κρυσταλλογραφικών δεδομένων

Εγγεγραμμένη χρήστης των Synchrotron Radiation Source EMBL-Hamburg Outstation, CLRC Daresbury Laboratory, Elettra-Trieste, ESRF-Grenoble Outstation τα οποία έχω επισκεφθεί για συλλογή κρυσταλλογραφικών δεδομένων και δεδομένων SAXS.

Γνώση ηλεκτρονικών υπολογιστών και ειδικών προγραμμάτων για την κινητική μελέτη ενζύμων (GraFit), για την επεξεργασία κρυσταλλογραφικών δεδομένων (όπως σειρά προγραμμάτων CCP4, O, προγράμμα μοριακών γραφικών PyMol κ.α)

### **Συμμετοχή σε χρηματοδοτούμενα ερευνητικά προγράμματα**

---

- Carbohydrate recognition and control by glycogen phosphorylase and other enzymes of carbohydrate metabolism and the design of potential antidiabetic drugs, EEC BIOTECHNOLOGY (1994-1996). A collaborative research programme with 6 participating laboratories. N° BIO2-CT94-3025.
- Crystallographic studies on glycogen phosphorylase-inhibitor complexes, Use of the Synchrotron Radiation Source in DORIS, EMBL, Hamburg, Germany (under the European Community Large Scale Facilities Programme), PX-95-238 (1995), PX-96-41 (1996), PX-97-6 (1997).
- Αναστολείς της γλυκογονικής φωσφορυλάσης ως εν δυνάμει αντιδιαβητικά φάρμακα. ΠΕΝΕΔ-225. Τομέας 3.1. (1996-1998), Υπουργείο Ανάπτυξης, Γενική Γραμματεία Ερευνας & Τεχνολογίας.
- Cryo-crystallographic studies of glycogen phosphorylase-inhibitor complexes, Use of the Synchrotrone Trieste, Trieste, Italy, 209/96 (1996), 129/97 (1997).
- Structure / function relationships in enzymes of glycogen metabolism, Wellcome Trust Biomedical Research Collaboration Grant (with the Laboratory of Molecular Biophysics, University of Oxford) 1997-2000.
- Σχέσεις δομής και λειτουργίας αλοστερικών πρωτεϊνών του μυϊκού κυττάρου: μοριακή αναγνώριση πρωτεϊνών-μικρομορίων και κατευθυνόμενος σχεδιασμός εν δυνάμει φαρμάκων (σε συνεργασία με Δρ. Σ.Ι. Τζάρτο, Ελληνικό Ινστιτούτο Παστέρ και Καθ. Κ. Σακαρέλλο, Παν. Ιωαννίνων, συντονιστής Ν.Γ. Οικονομάκος), ΕΠΕΤ II (ΠΕΝΕΔ 1999) (1999-2001).
- Calmodulin regulated protein kinases: an integrated and multidisciplinary approach on the molecular and cellular function of five prototypic members (CAMKIN 2002-2006). Χρηματοδότηση από την Ευρωπαϊκή Ένωση (The European Commission Improving Human Potential & the socio-economic knowledgebase)
- “Σχέσεις δομής-λειτουργίας των ανασυνδυσασμένων ανθρώπινων πρωτεϊνών TAFs9”. Πρόγραμμα ένταξης στο ελληνικό E&T σύστημα ερευνητών από το εξωτερικό ENTEP 2001-δράση ΕΠΑΝ Μέτρο 8.3 (κωδικός υποέργου 01EP115). Επιστημονικός υπεύθυνος Ν.Γ. Οικονομάκος.
- Functional interactions of apolipoprotein with the ABCA1 lipid transporter and the SR B1 HDL receptor that affect cholesterol homeostasis in circulation and brain (Apolipoprotein E). κωδ Ε.Ε 1331 .(Ινστιτούτο Βιολογίας ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος. Χρηματοδότηση από την Ευρωπαϊκή Επιτροπή.
- European consolidation and promotion of research capacity in the area of structure-based drug design (EUROSTRUCT-grant agreement 230146) CSA-SA\_FP7-REGPOT-2008-1, SP4-Capacities Coordination and Support Actions, Support Actions)

### **Μέλος επιστημονικών εταιρειών**

---

Μέλος της Ελληνικής Εταιρείας Βιοχημείας και Μοριακής Βιολογίας.  
 Μέλος της “The Biochemical Society”, UK.  
 Μέλος της Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας.

### **Συμμετοχή σε επιστημονικές συναντήσεις/συνέδρια**

---

➤

- Workshop, "Advanced Methods in Protein Crystallisation", Institute of Molecular Biotechnology, Ιένα, Γερμανία, 9 –10 Δεκεμβρίου 1999.
- 50<sup>ο</sup> Συνέδριο Ελληνικής Βιοχημικής και Βιοφυσικής Εταιρείας, Αθήνα Ιανουάριος 1999 (ανακοίνωση)
- 26<sup>th</sup> Meeting of the Federation of European Biochemical Societies (FEBS), Νίκαια, Γαλλία 19 - 24 Ιουνίου 1999 (παρουσίαση πόστερ)
- 1<sup>ο</sup> Συνέδριο Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας, Αθήνα 17-18 Μαΐου 2002
- British Crystallographic Association Spring Meeting 2003, York, UK, 15-17 Απριλίου 2003.
- Collaborative Project in Macromolecular Crystallography (CCP4) Study Weekend, Leeds, UK 4-5 January 2004.
- 11<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συμπόσιο Φαρμακευτικής Χημείας, Πάτρα 23-24 Ιανουαρίου 2004.
- (ανακοίνωση)
- CAMKIN Meeting, Protein kinases as targets for drug discovery. Αθήνα 26 Ιουνίου 2004, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών.
- 3<sup>ο</sup> Συνέδριο Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας, Πάτρα 22-24 Σεπτεμβρίου 2006.
- 4<sup>ο</sup> Συνέδριο Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας, Αθήνα 26-27 Σεπτεμβρίου 2008.

### **Ερευνητικό συγγραφικό έργο**

---

**Ξενογλωσσες δημοσιεύσεις σε περιοδικά με κριτές : 24**

**Annual Reports in Synchrotron Radiation Sites: 4**

**Ανασκοπήσεις : 1**

**Πρακτικά (proceedings) σε συνέδρια: 13**

**Κατατεθειμένες δομές: 30 (βλ. υπόμνημα)**

#### ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΛΗΡΩΝ ΞΕΝΟΓΛΩΣΣΩΝ ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΩΝ ΣΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΤΟΥ SCI

Kantsadi AL, Manta S, Psarra AM, Dimopoulou A, Kiritsis C, Parmenopoulou V, **Skamnaki VT**, Zoumpoulakis P, Zographos SE, Leonidas DD, Komiotis D. (2012) Eur J Med Chem. 2012 Aug;54:740-9.

Manta S, Xipnitou A, Kiritsis C, Kantsadi AL, Hayes JM, **Skamnaki VT**, Lamprakis C, Kontou M, Zoumpoulakis P, Zographos SE, Leonidas DD, Komiotis D. (2012) Chem Biol Drug Des. May;79(5):663-73.

Kantsadi AL, Hayes JM, Manta S, **Skamnaki VT**, Kiritsis C, Psarra AM, Koutsogiannis Z, Dimopoulou A, Theofanous S, Nikoleousakos N, Zoumpoulakis P, Kontou M, Papadopoulos G, Zographos SE, Komiotis D, Leonidas DD. (2012) ChemMedChem. Apr;7(4):722-32.

Argyri L, **Skamnaki V**, Stratikos E, Chroni A. (2011) Protein Expr Purif. Oct;79(2):251-7.

Hayes JM, **Skamnaki VT**, Archontis G, Lamprakis C, Sarrou J, Bischler N, Skaltsounis AL, Zographos SE, and Oikonomakos NG (2011) Proteins: Structure, Function & Bioinformatics 79, 703-719.

Tsirkone, V., Tsoukala, E., Lamprakis, C., Manta, S., Hayes, J.M., **Skamnaki, V.**, Drakou, C., Zographos, S., Komiotis, D. & Leonidas, D. (2010). Biorg.Med Chem 15;18(10):3413-25.

Venien-Bryan, C., Jonic, S., **Skamnaki, V.**, Brown, N., Bischler, N., Oikonomakos, N., Boisset, N & Johnson, L.N. (2009).. Structure 17, 117&#8211;127.

Brown, N., Petri, E., Lowe, E.D., **Skamnaki, V.**, Antrobus, R. & Johnson, L.N. (2007). Cell Cycle, 6, 1350-1359.

Cheng, K., Noble, M.E.M., **Skamnaki, V.**, Brown, N. R., Lowe, E.D., Kontogiannis, L., Shen, K., Cole, P.A., Siligardi, G. & Johnson, L.N. (2006). J. Biol. Chem. 281 (32):23167-79.

Davies, K.M., **Skamnaki, V.**, Johnson, L.N & Venien-Bryan, C. (2006) *J.Mol.Biol.* 359 (2): 453-63.

Honda, R., Lowe, E.D., Dubinina, E., **Skamnaki, V.T.**, Brown, N. & Johnson, L.N. (2005) *EMBO J*, 24, 452-463.

Cook, A., Lowe, E.D., Chrysinas E.D., **Skamnaki, V.T.**, Oikonomakos, N.G. & Johnson, L.N. (2002). *Biochemistry*, 41, 7301-7311.

Oikonomakos, N.G., Zographos, S.E., **Skamnaki, V.T.** & Archontis, G. (2002). *Bioorg. Med. Chem.*, 10, 1313-1319.

Oikonomakos, N.G., **Skamnaki, V.T.**, Osz, E., Szilagyi, L., Somsak L., Docsa, T., Toth, B. & Gergely, P. (2002). *Bioorg. Med. Chem.*, 10, 261-268.

**Skamnaki, V.T.** & Oikonomakos, N.G. (2000). *J. Protein Chem.* 6, 499-505.

Tsitsanou, K.E., **Skamnaki, V.T.** & Oikonomakos, N.G. (2000). *Arch. Biochem. Biophys.* 2, 245-254.

Oikonomakos, N.G., Schnier, J.B., Zographos, S.E., **Skamnaki, V.T.**, Tsitsanou, K.E. & Johnson, L.N. (2000). *J. Biol. Chem.*, 3, 34566-73.

Oikonomakos, N.G., **Skamnaki, V.T.**, Tsitsanou, K.E., Gavalas, N.G. & Johnson, L.N. (2000) *Structure* 8, 575-584.

**Skamnaki, V.T.**, Owen, D.J., Noble, M.E.M., Lowe, E.D., Oikonomakos, N.G. & Johnson, L.N. (1999). *Biochemistry*, 38, 14718-14730 (selected bibliography Biochemistry by Stryer).

Oikonomakos, N.G., Tsitsanou, K.E., Zographos, S.E., **Skamnaki, V.T.**, Goldmann, S. & Bischoff, H. (1999) *Protein Sci.* 8, 1930-1945.

Tsitsanou, K.E., Oikonomakos, N.G., Zographos, S.E., **Skamnaki, V.T.**, Gregoriou, M., Watson, K.A., Johnson, L.N. & Fleet, G.W.J. (1999). *Protein Sci.* 8, 741-749 (cover)

Heightman, T.D., Vasella, A., Tsitsanou, K.E., Zographos, S.E., **Skamnaki, V.T.** & Oikonomakos, N.G. (1998). *Helv. Chim. Acta*, 81, 853-864.

Lowe, E.D., Noble, M.E.M., **Skamnaki, V.T.**, Oikonomakos, N.G., Owen, D.J. & Johnson, L.N. (1997). *EMBO J.* 16, 6646-6658 (selected bibliography in Biochemistry by Stryer).

Zographos, S.E., Oikonomakos, N.G., Tsitsanou, K.E., Leonidas, D.D., Chrysinas, E.D., **Skamnaki, V.T.**, Bischoff, H., Goldman, S., Schram, M., Watson, K.A. & Johnson, L.N. (1997). *Structure* 5, 1413-1425

#### ANNUAL REPORTS IN SYNCHROTRON RADIATION SITES

Oikonomakos, N.G., Tsitsanou, K.E., **Skamnaki, V.T.**, and Zographos, S.E. (1999). Glycogen phosphorylase: a molecular target for structure assisted drug design. In EMBL, Hamburg Outstation, Annual Report 1999, 114-115

Oikonomakos, N.G., Zographos, S.E., **Skamnaki, V.T.**, and Tsitsanou, K.E. (2000). Structural studies on glycogen phosphorylase complexes with potent inhibitors of the enzyme: the binding of flavopiridol. Crystallographic studies of a very potent inhibitor of glycogen phosphorylase. In EMBL, Hamburg Outstation, Annual Report 2000, 197-198.

Oikonomakos, N.G., Zographos, S.E., **Skamnaki, V.T.**, and Archontis, G. (2001). Structural comparison between the crystal structures of muscle glycogen phosphorylase b and liver glycogen phosphorylase a complexed with indole-2-carboxamide inhibitors, potential antidiabetic drugs. In EMBL, Hamburg Outstation, Annual Report, 2001, 237-238.

Anastasi, E., Zographos, S., **Skamnaki, V.**, Leonidas, D., Kardarakis, R., Kovarev, P., Svergun, D., Schmoll, D., Defossa, E. & Oikonomakos, N. (2006). Small Angle X-ray Scattering of human glucokinase in complex with a potent activator In EMBL, Hamburg Outstation, Annual Report, 2006, 367-368.

ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΕΙΣ

Tsitsanou, K.E., Zographos, S.E., **Skamnaki, V.T.** & Oikonomakos, N.G. (1999). Molecular recognition in glycogen phosphorylase inhibitor design (review). *Review of Clinical Pharmacology and Pharmacokinetics*, **13**,

ΠΕΡΙΛΗΨΕΙΣ ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΕΩΝ ΣΕ ΣΥΝΕΔΡΙΑ

**Skamnaki, V.T.**, Owen, D.J., Noble, M.E.M., Lowe, E., Oikonomakos, N.G. & Johnson, L.N. (1999). Mutational studies on phosphorylase kinase. (26<sup>th</sup> Meeting of the Federation of European Biochemical Societies, Nice 19 - 24 June 1999) *Biochimie*, **81**, s264. (poster)

**Skamnaki, V.T.**, Owen, D.J., Noble, M.E.M., Lowe, E., Oikonomakos, N.G. & Johnson, L.N. (1999). Mutational studies on phosphorylase kinase (PhK): The role of the activation segment and the catalytic aspartate in PhK catalysis. (50<sup>th</sup> Conf. of the Hellenic Biochem. and Biophys. Soc.) *Biochem. Biophys. Newsletter* **45**, 13-14.

**Skamnaki, V.T.**, Cook, A., Johnson, L.N. (2004) Glycogen phosphorylase kinase (PhK) as molecular target for antidiabetic drugs. Book of Abstracts Π<sub>6</sub>-49. 11<sup>o</sup> Πανελλήνιο Συμπόσιο Φαρμακευτικής Χημείας, Πάτρα 23-24 Ιανουαρίου 2004.

Johnson, L.N., Brown, N., Honda, R., Lolli, g., Lowe, E.D. & **Skamnaki V.** (2005). Protein kinase substrate recognition and regulation. *Signal Transduction in cancer* Vol 16, p75. The Proceedings of the 2005 Miami Nature Biotechnology Winter Meeting, Miami, Florida 5-9 February 2005.

Bischler N, Jonic S, **Skamnaki V**, Oikonomakos N, Johnson L, Boisset N, and Vénien-Bryan C. Three-dimensional structure of phosphorylase kinase at 10 Å resolution - Localisation of individual subunits, Gordon Research Conference on Three Dimensional Electron Microscopy, June 25-30, 2006, Il Ciocco, Barga, Italy. (poster)

Bischler, N., Jonic, S., Larquet, E., Oikonomakos, N., **Skamnaki, V.**, Johnson, L, Venien-Bryan, C & Boisset, N. (2006) Étude structurale de la phosphorylase kinase (PhK) de mammifère par cryo-MET 3D et analyse d'images. Abstracts p.118. 20<sup>ème</sup> Congrès de la Société Française de Biophysique. 14 – 19 Octobre 2006, Anglet, Pyrénées-Atlantiques, France (poster).

Johnson, L., Brown, N., Lowe, E., **Skamnaki, V.**, Kontogiannis, L.(2007) Structural studies on cell cycle regulatory proteins L-03 *The Role of Structures in Biology- Past, Present and Future* 3rd BIOXHIT Annual Meeting 19th-21st February 2007, Didcot, UK.

Papageorgiou, D., Hayes, J., Sarrou,J., Bischler,N., **Skamnaki, V.**, Zographos, S., Leonidas, D., Oikonomakos, N., Skaltsounis, A.L.,Wascholowski, V., Sarli, V., Giannis, A. (2007) *In vitro* and *in silico* studies of PhK-γtrnc for the development of anti-hyperglycaemic drugs using structure-based drug design. 59<sup>o</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Βιοχημείας και Μοριακής Βιολογίας, Αθήνα 7-9 Δεκεμβρίου 2007. Πρακτικά PPO70 σελ. 47.

Georgiadou, D., Evnouhidou, E., **Skamnaki, V.**,Chroni, A., Hearn, A., Rock K. & Stratikos, E. (2007) Overexpression, purification and characterization of the role of placental leucine aminopeptidase in antigenic peptide generation. 59<sup>o</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Βιοχημείας και Μοριακής Βιολογίας, Αθήνα 7-9 Δεκεμβρίου 2007. Πρακτικά PPO80 σελ. 49.

Georgiadou, D., Evnouhidou, E., **Skamnaki, V.**,Chroni, A., Hearn, A., Rock K., York, I., Georgiadis, D & Stratikos, E. (2008) Placental leucine aminopeptidase trimming of antigenic peptide precursors: a potential role in antigen presentation. 4<sup>o</sup> Συνέδριο Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής , Αθήνα 26-27 Σεπτεμβρίου 2008, Πρακτικά σελ57.

Venien-Bryan, C., Jonic, S., **Skamnaki, V.**, Brown, N., Bischler, N., Oikonomakos, N., Boisset, N & Johnson, L.N. (2008) Structure of phopshorylase kinase holoenzyme at 9.9 Å resolution, locations of the catalytic subunit and the substrate glycogen phosphorylase. 4<sup>o</sup> Συνέδριο Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής , Αθήνα 26-27 Σεπτεμβρίου 2008, Πρακτικά σελ 25.

**Skamnaki, V.T.**, Savvidou, M., Katsandi, A., Psarra, A.M., Kontou, M., Kouretas,D., Leonidas,DD

(2010) Natural flavonoid catechin inhibits glycogen phosphorylase by binding at new allosteric site. 5<sup>o</sup> Συνέδριο Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής, Λαρίσα 24-25 Σεπτεμβρίου 2010, Πρακτικά σελ 16.

Hayes, JM., **Skamnaki, VT.**, Archontis, G., Lamprakis, J., Sarrou, J., Bischler, N., Skaltsounis, A.L., Zographos, S.E., Oikonomakos, N.G. (2010) Refinement and validation of phosphorylase kinase ATP-binding site inhibitor complexes using molecular dynamics and MM-GBSA calculations. . 5<sup>o</sup> Συνέδριο Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής, Λαρίσα 24-25 Σεπτεμβρίου 2010, Πρακτικά σελ 34.

