

MKE Szerves- és Gyógyszerkémiai Szakosztályának QSAR és Modellezési Szakcsoportja és az MTA Szegedi Akadémiai Bizottságának Kemometria és Molekulamodellezés Munkabizottsága által szervezett

KeMoMo-QSAR 2016 szimpózium

Időpont: 2016. május 12. 10:00 - május 13. 12:10

Helyszín: MTA MAB Székház (Miskolc, Erzsébet tér 3.)

A szimpózium programja:

2016. május 12., csütörtök

10:00-10:10 Megnyitó

Elméleti Kémiai szekció Üléselnök: Csizmadia G. Imre

10:10-10:25 Renáta Zsanett Boros, Béla Viskolcz, Imre G. Csizmadia, Anita Rágyanszki, László Farkas (BorsodChem Zrt., Institute of Chemistry, University of Miskolc, Department of Chemistry, University of Toronto):

Empirical and Theoretical Study on Molecules of Isocyanate Synthesis

10:25-10:40 John Justine Villar, Anita Rágyanszki, Adrian Roy Valdez, David Setiadi, Béla Viskolcz, Imre G. Csizmadia (Scientific Computing Laboratory, Department of Computer Science, University of the Philippines Diliman, Institute of Chemistry, University of Miskolc, Department of Chemistry, University of Toronto):

Analysis of Models for Analytical Fitting of Peptide Conformational Potential Energy Surfaces

10:40-10:55 Anita Rágyanszki, Imre G. Csizmadia, Béla Viskolcz (Institute of Chemistry, University of Miskolc, Department of Chemistry, University of Toronto):

Formaldehyde and its tautomers as the basic building blocks of Carbohydrate Synthesis in Outer-Space

10:55-11:10 Csonka Gábor (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, Department of Physics, Temple University):

Új és hatékony módszerek reakció-, aktiválási- és nem-kovalens kölcsönhatási energiák pontos és precíz számolására

11:10-11:25 Szünet

Enzimológiai szekció Üléselnök: Keserű György Miklós

11:25-11:40 Bánóczy Gergely, Varga Andrea, Nagy Botond, Bencze László Csaba, Gellért Ákos, Juhász Angéla, Paizs Csaba, Poppe László (BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Babes-Bolyai Tudományegyetem, MTA ATK Mezőgazdasági Intézet):

Pantoea agglomerans fenilalanin aminomutáz enzim számítógépes és kísérletes vizsgálata – a racionális enzimtervezés előkészítése

11:40-11:55 Karancsiné Menyhárd Dóra, Dürvanger Zsolt, Magyar Csaba, Oláh Julianna, Kiss Dóra Judit (ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium, MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport, ELTE Kémiai Intézet, MTA TTK Enzimológiai Intézet, BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):

Pszeudouridináz enzimek vizsgálata molekuladinamikai szimulációkkal

11:55-12:10 Kiss Dóra Judit, Oláh Julianna, Tóth Gergely, Magyar Csaba, Karancsiné Menyhárd Dóra, Ferenczy György (ELTE Kémiai Intézet, BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, MTA TTK Enzimológiai Intézet, ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium, MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport, MTA TTK Szerves Kémiai Intézet):

Pszeudouridináz katalizált uridin izomerizáció mechanizmusának vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel

12:10-13:10 Ebédszünet

Kemometria szekció Üléselnök: Rajkó Róbert