

13:55-14:10 Szünet

Molekuladokkolási szekció Üléselnök: Bogár Ferenc

14:10-14:25 Kelemen Ádám Andor, Kiss Róbert, Ábrányi-Balogh Péter, Bozsó Zsolt, Dürvanger Zsolt, Harmat Veronika, Keserű György Miklós, Tóth Gergely (MTA TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, MTA-TTK-NAP B Gyógyszer- kutató Csoport - Neurodegeneratív Betegségek, SZTE Orvosi Vegytani Intézet, ELTE Kémiai Intézet, MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):

Új kovalens DJ-1 ligandumok azonosítása, továbbfejlesztési lehetőségeinek vizsgálata kovalens dokkolással és jelentőségük a Parkinson-kór diagnosztikájában

14:25-14:40 Bajusz Dávid, Ferenczy György, Keserű György Miklós (MTA TTK Szerves Kémiai Intézet):

Új, potens Janus kináz 1 inhibitorok azonosítása virtuális szűréssel

14:40-14:55 Bata Zsófia, B. Jones, R. J. Kazlauskas (BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, UMN Biotechnology Institute):

R vagy S, hogyan döntenek a hidroxinitrilázok?

14:55-15:10 Ecker János, Fülöp László (SZIE Kémia Tanszék):

Extracelluláris lignin-peroxidáz atrazin bontásának modellezése

15:10-15:25 Szünet

Elméleti Kémiai szekció Üléselnök: Viskolcz Béla

15:25-15:40 Oláh Julianna, Izrael Richárd, Dargó Gergő, Balogh György T., Riethmüller Eszter, Maszler Péter, Könczöl Árpád, Szabó Tamás, Szentjóni Hajnalka, Németh Tamás, Tóth Tünde, Huszthy Péter (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Richter Gedeon Nyrt):

PKa predikció és kvantumkémia

15:40-15:55 Buzsáki Dániel, Kelemen Zsolt, Nyulászi László (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):

Ha NHC találkozik foszforral...

15:55-16:10 Násztor Zoltán, Dér András, Bogár Ferenc (MTA SZBK Biofizikai Intézet, MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport):

A Collins szabály és a Hofmeister effektus

16:10-16:25 Szünet

Kemometria szekció Üléselnök: Héberger Károly

16:25-16:40 Erdélyi Péter, Rajkó Róbert (SZTE Folyamatmérnöki Intézet):

Kétmódusú szemcseméret-eloszlások illesztése

16:40-16:55 Rajkó Róbert (SZTE Folyamatmérnöki Intézet):

Legfrissebb eredményeink a görbeillesztés nélküli profilkinyerés (SMCR) területén

16:55-17:10 Németh Zsolt István, Rákosa Rita (NYME Kémiai Intézet):

Vizes elegyek NIR abszorpciójának PCA elemzése: a koncentrációfüggő csúcsalak- változás faktor-, ill. hibaszerepű főkomponensei

19:00- Szimpózium-vacsora

2016. május 13., péntek

Kemometria szekció Üléselnök: Tóth Gergely

9:00-9:15 Barna Dóra, Elek János (Science Port):

Kolorimetriás koncentráció-meghatározás digitális képfeldolgozással

9:15-9:30 Elek János, Horányi Tamás (Science Port, Eva Orvosbiológiai Európai Fejlesztő Intézet):

Hatóanyag-tartalom NIR spektroszkópiás homogenitás-vizsgálata arckrémekben

9:30-9:45 Koncz Viktória (BME Fizika Tanszék):

Adaptív hálógenerálási algoritmus gyorsítási lehetőségeinek vizsgálata statisztikai módszerekkel

9:45-10:00 Kemény Sándor, Kunovszki Péter (BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék):

Ami közismert, és ami nem a két egyoldali t-próbával kapcsolatban

10:00-10:15 Szünet