

Program csütörtök (május 26.)

9.30-10.15 Daru János

ELTE Kémiai Intézet
Machine Learning a molekuláris
szimulációkban

10.15-10.40 Kristóf Tamás

PE Mérnöki Kar
Kinetikus Monte Carlo:
egy lehetséges átkötés a mezoszkopikus
szint modellezéséhez

10.40-11.00 Szünet

11.00-11.45 Tóth Gergely

ELTE Kémiai Intézet
Az inverz elmélettől Langevinen, Morin
és Zwanzigon át a memória függvényig

11.45-12.10 Bakó Imre

*ELKH TTK Elméleti Kémiai
Kutatócsoport*
Mi van a ciklodextrinek belsejében?

12.10-12.35 Pusztai László

Wigner Fizikai Kutatóközpont
Multiscale és anyagszerkezet: diffrakciós
módszerek és Reverse Monte Carlo
modellezés

12.35-13.45 Ebédszünet

13.45-14.30 Legeza Örs

Wigner Fizikai Kutatóközpont
Molekuláris rendszerek szimulációja
tenzorhálózat algoritmussal és
kvantuminformációs eszközökkel

Program csütörtök (május 26.)

14.30-15.15 Madarász Ádám

ELKH TTK Elméleti Kémiai Kutatócsoport
Atommagok kvantumeffektusainak
modellezése pályaintegrál módszerekkel

15.15-15.30 Szünet

15.30-16.15 Stirling András

*ELKH TTK Elméleti Kémiai Kutatócsoport;
Eszterházy Károly Katolikus Egyetem*
Ritka események és aktiválást igénylő
folyamatok szimulálása

16.15-16.40 Járvás Gábor

PE Mérnöki Kar
N-glikánok elektroforetikus mobilitásának
becslése mesterséges neurális hálózatok és
COSMO-RS szigma momentumok
alkalmazásával

16.40-17.00 Szünet

17.00-17.35 Kiss Dóra

ELKH TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport
Bevezetés a QM/MM világába- fókuszban a
határok

17.35-18.00 Ferenczy György

ELKH TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport
Egy RNS módosító mechanizmus
feltérképezése és terápiás lehetőségei

18.00-18.25 Mihalovits Levente

ELKH TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport
Kovalens inhibíció modellezése QM/MM
molekuladinamikai szimulációkkal

19.00 Vacsora



MTA VEAB

tab.mta.hu/veszpremi-teruleti-bizottsag



PE Mérnöki Kar
mk.uni-pannon.hu



ELTE TTK
Kémiai Intézet
chemistry.elte.hu



mscms.uni-pannon.hu



tothgergely.web.elte.hu