

MEGHÍVÓ

Tisztelettel meghívjuk Önt és kedves kollégáit a **Második Magyar Schrödinger Felhasználói Találkozóra**, amelyen a délelőtti szekcióban magyar felhasználók és a Schrödinger cég szakemberei számolnak be a Schrödinger Suite programcsomag néhány sikeres alkalmazásáról, míg délután egy interaktív bemutató keretében az érdeklődők maguk is kipróbálhatják a Schrödinger programokat egy adott témakörben. A bemutatón 20 laptop számítógépet biztosítunk a résztvevők számára.

Helyszín: Danubius Hotel Gellért, Gobelín Terem, 1111 Budapest, Szent Gellért tér 1.

Időpont: 2011. november 23. 10.00–16.30 óra között

Program:

- 10.00 **Welcome and Introduction**
- 10.10 **Márton Vass, Ákos Tarcsay, György M. Keserű (Gedeon Richter)**
Cooperative docking with Glide
- 10.30 **Gábor Paragi, Ferenc Bogár, Balázs Jójárt, Ákos Tarcsay, Róbert Kiss, Botond Penke, György M. Keserű (University of Szeged, Gedeon Richter, mcule.com)**
Enrichment factor calculations on ensemble-based human H4 receptor models
- 10.50 **Ákos Gellért, Katalin Nemes, Katalin Kádár, Katalin Salánki, Ervin Balázs (Agricultural Research Institute, Agricultural Biotechnology Center)**
The C-terminal domain of the 2b protein of Cucumber mosaic virus is stabilized by Mg(II) ion coordination. A molecular dynamics simulation
- 11.10 **Coffee break**
- 11.30 **Jörg Weiser (Schrödinger)**
Structure-Based Prediction of Cytochrome P450 Sites of Metabolism
- 12.00 **Daniel Cappel (Schrödinger)**
Ligand-Based Approaches in Drug Design - Phase Field-Based QSAR & Rapid Shape-Based Alignment and Virtual Screening based on Atom-Pair Similarities
- 12.30 **Lunch break**
- 13.30 **Schrödinger workshop conducted by Daniel Cappel (Schrödinger)**
Structure-based Virtual Screening on Factor Xa including Prediction and Optimization of the Target Structure - Coffee break in between
- 16.30 **Closing remarks**

A kávészünetekben frissítőket és teasüteményt szolgálunk fel, az ebédszünetben pedig tisztelettel meghívjuk a rendezvény résztvevőit a Gellért szálló éttermébe ebédre.

A rendezvényen való részvétel díjmentes, a költségeket a Schrödinger cég állja.

A résztvevők száma korlátozott, ezért kérjük, hogy részvételi szándékukat szíveskedjenek mielőbb, de legkésőbb 2011. november 18-ig e-mailben jelezni a mellékelt jelentkezési lapon. Köszönjük.

Budapest, 2011. november 8.