

MEGHÍVÓ

Tisztelettel meghívjuk Önt és kedves kollégáit a **3. 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 tanfolyam keretében az érdeklődők maguk is kipróbálhatják a Schrödinger programokat egy adott témakörben. A tanfolyamon résztvevők számára biztosítjuk a szükséges számítógépeket.

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

Időpont: 2012. november 22. 10.00–16.30 óra között

Program:

- 10.00 **Welcome and Introduction**
- 10.10 **Márton Vass, György M. Keserű (Gedeon Richter)**
Multiple docking in support of the fragment linking strategy
- 10.30 **Dóra K. Menyhárd, Petra Rovó, András Perczel (MTA TKI Protein Modeling Research Group, ELTE TTK Laboratory of Structural Chemistry and Biology)**
Small protein - big puzzle. Molecular modeling of a Trp-cage miniprotein
- 10.50 **Coffee break**
- 11.10 **Daniel Cappel (Schrödinger)**
Approaches to improving virtual screening
- 11.50 **Jörg Weiser (Schrödinger)**
Advances in computer-aided drug design using MD simulations
- 12.30 **Lunch break**
- 13.30 **Schrödinger training conducted by Daniel Cappel (Schrödinger)**
Facilitating structure-based biologics design
 - Antibody modeling*
 - Protein-protein docking (Epitope identification via protein-protein docking)*
 - Protein analysis (Protein-report, Ramachandran plot, residue analysis)*
 - Residue scanning (Alanine scanning)*
 - Affinity / stability optimization*
 - 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 résztvevők száma korlátozott, ezért kérjük, hogy részvételi szándékukat szíveskedjenek mielőbb, de legkésőbb 2012. november 16-ig e-mailben vagy faxon jelezni a mellékelt jelentkezési lapon. Köszönjük.

Budapest, 2012. november 9.