

Urnik delavnice “Računske in statistične metode v kemiji”, 19.-21.10.2021

Torek, 19.10.

8.45-9.00 Uvod in tehnične podrobnosti

9.00-12.30 Uporaba molekulske dinamike v biomolekularnih sistemih

12.30-14.00 Odmor

14.00-17.30 Modeliranje encimskih reakcij in reakcij v raztopini

Sreda, 20.10.

9.00-12.30 Kvantno kemijsko modeliranje trdne snovi, površin in adsorpcije

12.30-14.00 Odmor

14.00-17.30 Večskalne simulacije mehke in biološke snovi

Četrtek, 21.10.

9.00-12.30 Kemijska statistika in uporaba nevronske mreže v kemiji

12.30-14.00 Odmor

14.00-17.30 Uporaba molekulskih simulacij pri načrtovanju zdravilnih učinkovin

Znotraj vsakega dopoldanskega (9.00-12.30) in popoldanskega (14.00-17.30) sklopa je predviden vsaj po en odmor.