

Pozvánka na prednášku

Properties of proteins and nano materials calculated with the fragment molecular orbital (FMO) method

D. G. Fedorov

Research Center for Computational Design of Advanced Functional Materials (CD-FMat), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Tsukuba, Japan

Vážení kolegovia,

dovoľujeme si Vás srdečne pozvať na prednášku Dr. Fedorova, ktorá sa uskutoční v prednáškovej miestnosti **AMOS na Prírodovedeckej Fakulte UK** dňa **2. 8. 2019 o 10:30**.

Prednáška je orientovaná na širšiu vedeckú komunitu z oblasti výskumu štruktúry a funkcie proteínov, príp. iných bio-makromolekúl. Cieľovú skupinu poslucháčov možno rozdeliť do dvoch kategórií. Jedna sú **teoretickí chemici, biofizici**, ktorí sa oboznámia s najnovším stavom v oblasti vývoja a implementácie pokročilých výpočtových FMO metód aplikovateľných na štúdium vlastností a interakcií v a medzi proteínmi. Druhou, sú **biochemici** a/alebo **štrukturálni/molekulárni biológovia** pracujúci s proteínmi. Títo sa rovnako dozvedia čo všetko je v súčasnosti už možné študovať presnými *ab initio* metódami, alebo ako teoretické výsledky môžu priniesť jasnejšiu interpretáciu experimentálnych pozorovaní. Veríme, že je jednoduchšie nadobudnúť predstavu o možnostiach tejto “state of the art” metódy výpočtovej chémie formou seminára, ako pracovným samoštúdiom. Rovnako veríme, že takouto formou je možné napomôcť plodnejšej spolupráci teoretických a experimentálnych skupín v oblasti biomolekúl a otvárať dvere pre nové smery vývoja teoretických metód, tak, ako je to už roky praxou pri štúdiu malých molekúl.

Tešíme sa na Vašu účasť!

Invitation to the lecture

Properties of proteins and nano materials calculated with the fragment molecular orbital (FMO) method

D. G. Fedorov

Research Center for Computational Design of Advanced Functional Materials (CD-FMat), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Tsukuba, Japan

Dear colleagues,

it is a pleasure to invite you cordially to the lecture by Dr. Fedorov, which will be held in the seminar room **AMOS at the Faculty of Natural Sciences UK on the 2nd of August 2019 at 10:30.**

The lecture is intended for the broader scientific community who's research is oriented on structural and/or functional study of proteins and other large bio-molecules. The target audience may be split into two subcategories. Firstly, theoretical chemists, biophysicists etc. might be interested to learn about the current state of the development and implementation of the FMO method – a method tailored for the study of structure, energetics and interactions of large molecules at the level of electronic structure theory. Secondly, biochemists and structural/molecular biologists working with proteins can benefit from this lecture too. These specialists can broaden their perspective on what can at present be studied with *ab initio* methods in their field and establish links to experimental observations. We believe that it is more effective to attain basic knowledge of the possibilities of this state of the art method (FMO) rather than by laborious self-education. Finally, we hope that sharing experimental expectations in the field of proteomics with theoreticians can induce new directions in the method development.

We are awaiting you at the talk!