



MEGHÍVÓ

Az MTA VEAB Fizikai Munkabizottsága és a Komplex Molekuláris Rendszerek
Modellezése és Szimulációja Kutatócsoport

2018. szeptember 10-én (hétfő) 10:00 órakor

közös tudományos előadást szervez, melyre Önt és munkatársait tisztelettel
meghívja.

Előadó:

Dr. Gerardo Odriozola

(Área de Física de Procesos Irreversibles, División de Ciencias Básicas e Ingeniería,
Universidad Autónoma Metropolitana, Av. San Pablo 180 Col. Reynosa, 02200, Ciudad de
México, México)

Előadás címe és absztraktja:

Entropy and assembling: playing with toy models

Forces acting on a couple of two relatively close nano-sized particles arise from their direct interactions and from the more complex solvent-mediated interaction. A possible way to deal with both contributions to obtain the effective force acting on a couple of nano-sized particles is through Monte Carlo simulations, where the couple is set at fixed positions and the small particles are allowed to sample the configuration space. This way, the effective total force acting on the pair can be split into an electrostatic contribution and a contact (or depletion, or entropic) contribution. By obtaining the effective force as a function of the inter-particle distance, we can then integrate to obtain the effective pair-potential map. As an example, we apply this strategy to a hard, simple model of substrate-enzyme complex, and to a DNA-DNA model under phospholipid-membrane confinement. Results point to the key role of entropy in assembling phenomena.

Az előadás helyszíne:

Pannon Egyetem, Fizika és Mechatronika Intézet, C333 terem

Veszprém, Egyetem u. 10

Varga Szabolcs

VEAB Fizikai Munkabizottság

Boda Dezső

MSCMS Kutatócsoport

<http://mscms.uni-pannon.hu/>