

MEGHÍVÓ

Tisztelettel meghívjuk Önt és kedves munkatársait az MKE Szerves- és Gyógyszerkémiai Szakosztályának **QSAR és Modellezési Szakcsoportja** és az MTA Szegedi Akadémiai Bizottságának **Kemometria és Molekulamodellzés Munkabizottsága** által szervezett kétnapos KeMoMo–QSAR 2017 szimpóziumra.

Helyszín és időpont:

MTA SZAB Székház (Szeged, Somogyi u. 7.)
2017. június 1. 10:00 órától június 2. 12:10 óráig

A szimpózium programja:

2017. június 1., csütörtök

10:00-10:10 **Megnyitó**

Kemometriai szekció

Üléselnök: Héberger Károly

10:10-10:25 **Rajkó Róbert, Mahsa Akbari Lakeh, Hamid Abdollahi (SZTE MK, IASBS, Zanzan, Irán):**

Lokális rang-vesztés okozta problémákról (On local rank-deficiency caused problems)

10:25-10:40 **Erdélyi Péter, Rajkó Róbert (SZTE MK):**

Eloszlások normalitás-vizsgálatának nehézségei

10:40-10:55 **Mihalkó József, Rajkó Róbert (SZTE MK):**

Többváltozós folyamatszabályozás vizsgálata R környezetben

10:55-11:10 **Nagy Brigitta, Gyürkés Martin, Farkas Attila, Nagy Zsombor Kristóf, Marosi György (BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék):**

Folyamatos gyógyszergyártási lépések nyomon követése és szabályozása Raman-spektrumokon alapuló kemometriai módszerek segítségével

11:10-11:25 **Szünet**

Elméleti kémiai szekció

Üléselnök: Paragi Gábor

11:25-11:40 **R. Zsanett Boros, Milán Szőri, Anita Rágyanszki, László Farkas, Béla Viskolcz (BorsodChem Zrt., Institute of Chemistry, University of Miskolc, Department of Chemistry, University of Toronto, Canada):**

Theoretical Investigation of the Methylenediphenyl Diamine Synthesis

11:40-11:55 **Anita Rágyanszki, Béla Fiser, Béla Viskolcz, Imre G. Csizmadia (Institute of Chemistry, University of Miskolc, Department of Chemistry, University of Toronto, Canada, Ferenc Rákóczi II. Transcarpathian Hungarian Institute, Beregszász, Ukraine):**

Formation Mechanism of the Simplest Carbohydrate in Interstellar Medium

- 11:55-12:10 **Andrea Guljas, John Justin Villar, Béla Fiser, Anita Rágyanszki, Balázs Jójárt, Béla Viskolcz, Imre G. Csizmadia (Institute of Chemistry, University of Miskolc, Department of Chemistry, University of Toronto, Canada, Scientific Computing Laboratory, Department of Computer Science, University of the Philippines, Ferenc Rákóczi II. Transcarpathian Hungarian Institute, Beregszász, Ukraine, Department of Chemical Informatics, University of Szeged):**
Computational Study of TRPV1 Ligands
- 12:10-12:25 **Béla Fiser, Anita Rágyanszki, Imre G. Csizmadia, Béla Viskolcz (Institute of Chemistry, University of Miskolc, Ferenc Rákóczi II. Transcarpathian Hungarian Institute, Beregszász, Ukraine, Department of Chemistry, University of Toronto, Canada):**
Antioxidant Potential of Glutathione Analogues

12:25-13:25 **Ebédészünet**

Molekulamodelllezési szekció Üléselnök: Bogár Ferenc

- 13:25-13:40 **Bánóczy Gergely, Hargitai Csilla, Weiser Diána, Nagy Flóra, Oláh Márk, Poppe László (BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék):**
Számításos enzimmértékség alkalmazása a Candida antarctica B lipáz esetében
- 13:40-13:55 **Farkas Ödön (ELTE TTK Kémiai Intézet Szerves Kémiai Tanszék, ELTE TTK Kémiai Intézet Kémiai Informatikai Laboratórium):**
Valódi Newton optimalás tapasztalatai molekulamechanikai környezetben
- 13:55-14:10 **Krámos Balázs (Richter Gedeon Nyrt):**
Másfél év molekulamodellzőként a gyógyszerkutatásban

14:10-14:25 **Szünet**

Molekuladinamikai szekció Üléselnök: Gáspári Zoltán

- 14:25-14:40 **Gellért Ákos, Nemes Katalin, Almási Asztéria, Vági Pál, Kádár Katalin, Salánki Katalin (MTA ATK Állatorvos-tudományi Intézet, MTA ATK Növényvédelmi Intézet, ELTE TTK Növény szerkezet-tani Tanszék):**
Foszforiláció szabályozza az uborka mozaik vírus 2b fehérje szupresszor aktivitását és sejten belüli lokalizációját
- 14:40-14:55 **Bálint Mónika, Hetényi Csaba (PTE ÁOK Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet):**
Hogyan csomagoljunk be egy célpontot?
- 14:55-15:10 **Bajusz Dávid, Bettina Wingelhofer, Keserű György Miklós, Richard Moriggl (MTA TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, Ludwig Boltzmann Institute for Cancer Research, Medical University Vienna):**
Fehérje-fehérje kölcsönhatást gátló ligandum vizsgálata egyensúlyi molekuladinamikával
- 15:10-15:25 **Karancsiné Menyhárd Dóra, Taricska Nóra, Bokor Mónika, Tompa Kálmán, Perczel András (MTA-ELTE Fehérjemodellző Kutatócsoport, ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet, Wigner Fizikai Kutatóközpont):**
Fehérjék, jégbe fagyva. NMR és MD szimulációs vizsgálatok

15:25-15:40 **Szünet**

Kemometriai szekció**Üléselnök: Rajkó Róbert**

- 15:40-15:55 **Németh Zsolt István, Rákosa Rita (Soproni Egyetem, Erdőmérnöki Kar, Kémiai Intézet):**
Koncentrációfüggő faktorhatások érzékelhetősége PCA alkalmazásával
- 15:55-16:10 **Kapási Anriett, Elek János (Science Port):**
Poliszorbát típusú micellaképző koncentrációjának UV spektrofotometriás meghatározása többváltozós adatelemzéssel
- 16:10-16:25 **Daróczi Csilla, Elek János (Science Port):**
ED-XRF mérés kalibrációja "nem detektálható" elemek mennyiségi analízise
- 16:25-16:40 **Tóth Gergely, Sasan AmariAmir (ELTE Kémiai Intézet):**
Szeriálás, a kemometriából kifejejtett módszer
- 16:40-16:55 **Szünet**

Elméleti kémiai szekció**Üléselnök: Jójárt Balázs**

- 16:55-17:10 **Benedek Zsolt (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):**
Szililén és germilén komplexek szintetikus alkalmazásainak vizsgálata
- 17:10-17:25 **Hoffka Gyula, Komáromi István (DE ÁOK Klinikai Laboratóriumi Kutató Tanszék):**
A mikrobiális transzglutamináz reakció vizsgálata hibrid QM/MM (ONIOM) módszerekkel
- 17:25-17:40 **Balogh Gábor, Komáromi István (DE ÁOK Klinikai Laboratóriumi Kutató Tanszék):**
A véralvadás XIII-as faktorának transzglutamináz reakciója; az első lépés (acyl-enzim képződés) modellezése hibrid QM/MM módszerek segítségével
- 17:40-17:55 **Szünet**

Elméleti kémiai szekció**Üléselnök: Viskolcz Béla**

- 17:55-18:10 **Jákli Imre, Sággy Péter, Perczel András (MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport, ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium):**
Gyűrűs hexopiranózok konformer sokaságának kvantumkémiai vizsgálata
- 18:10-18:25 **Paragi Gábor, Kupihár Zoltán, Endre Gábor, Célia Fonseca Guerra, Kovács Lajos (MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport, SZTE ÁOK Orvosi Vegytani Intézet):**
5-szubsztituált Uracil önszerveződő tulajdonságának vizsgálata
- 18:25-18:40 **Kégl Tamás (PTE TTK Szervetlen Kémia Tanszék):**
Energia dekompozíciós módszerek az átmenetifém-komplexek elektronszerkezetének felderítéséhez
- 19:00- **Szimpózium-vacsora**

2017. június 2., péntek

Molekuladinamikai szekció**Üléselnök: Bajusz Dávid**

- 9:00-9:15 **Hegedűs Tamás (MTA-SE Molekuláris Biofizikai Kutatócsoport):**
Az ABCG2 multidrog transzporter szerkezetének és működésének in silico jellemzése
- 9:15-9:30 **Kiss Dóra Judit, Sergio Decherchi, Andrea Cavalli, Keserű György Miklós (MTA TTK):**
 β 2-adrenoreceptor ligandumok rangsorolása MD szimulációkból számított tartózkodási idejük alapján
- 9:30-9:45 **Dudola Dániel, Kovács Bertalan, Gáspári Zoltán (PPKE ITK):**
Kísérletesen meghatározott belső dinamikát tükröző fehérjeszerkezeti sokaságok elemzése a CoNSEnsX+ szerverrel
- 9:45-10:00 **Gáspári Zoltán, Czajlik András, Kovács Bertalan (PPKE ITK):**
Parvulin típusú prolin izomerázok dinamikus szerkezeti sokaságainak összehasonlító elemzése: összeáll a kép?
- 10:00-10:15 **Szünet**

Kemometriai szekció**Üléselnök: Tóth Gergely**

- 10:15-10:30 **Rácz Anita, Fodor Marietta, Héberger Károly (MTA TTK, SZIE ÉTK):**
Milyen tényezőktől függ a többváltozós kalibráció? - FT-NIR spektrumokra vonatkozó modellek összehasonlító elemzése
- 10:30-10:45 **Rácz Anita, Gere Attila, Bajusz Dávid, Héberger Károly (MTA TTK, SZIE ÉTK):**
Az osztályt modellező módszerek gyöngyszeme: miért is nem lett a SIMCA standard?
- 10:45-11:00 **Pusztai Éva, Vágó Emese, Kemény Sándor (BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék):**
Biodekontamináció sikerességének ellenőrzése biológiai indikátorokkal
- 11:00-11:15 **Szünet**

Molekulamodelllezési szekció**Üléselnök: Keserű György Miklós**

- 11:15-11:30 **Balogh Balázs, Barbara Parrino (SE Szerves Vegytani Intézet):**
Topoizomeráz I gátló hatású izoindolo[2,1-a]kinoxalin-6-iminek vizsgálata molekulamodelllezési módszerekkel
- 11:30-11:45 **Bogár Ferenc (MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport, SZTE ÁOK Orvosi Vegytani Intézet):**
Szigma-1 receptor agonisták kötődésének számítógépes vizsgálata
- 11:45-12:00 **Gera János, Penke Botond, Fülöp Livia, Paragi Gábor (MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport, SZTE ÁOK Orvosi Vegytani Intézet):**
Amiloid beta monomer elméleti vizsgálata: dimerizáció, ligandkötődés, mutációk
- 12:00-12:10 **Zárszó**

Üdvözléssel,

Dr. Lopata Antal

a QSAR és Modellezési Szakcsoport elnöke