

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 Molekulamodellezés Munkabizottsága** által szervezett kétnapos KeMoMo–QSAR 2022 szimpóziumra.

Helyszín és időpont:

MTA SZAB székház (Szeged, Somogyi u. 7.)
2022. június 2. 10:00 órától június 3. 12:50 óráig

A szimpózium programja:

2022. június 2., csütörtök

10:00-10:10 **Megnyitó**

Elméleti kémiai szekció I

Üléselnök: Paragi Gábor

- 10:10-10:30 **Dékány Attila Ádám, Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**
S_N2 reakciók szilícium centrumon: a F⁻ + SiH₃Cl rendszer dinamikája
- 10:30-10:50 **Tasi Domonkos Attila, Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**
Rendhagyó reakcióút OH⁻ + CH₃F esetén: az oxidion szubsztitúció
- 10:50-11:10 **Győri Tibor, Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**
Jobb Hartree-Fock megoldások keresésének automatizálása a ManyHF módszerrel

11:10-11:20 **Szünet**

Kemometriai szekció I

Üléselnök: Héberger Károly

- 11:20-11:40 **Kemény Sándor (BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék):**
Hogy bánik el Sherlock Holmes a fajtaselektációs problémával
- 11:40-12:00 **Rajkó Róbert (PTE TTK):**
Egyértelmű felbontás érvényesítése egyetlen profilhalmaz-becslés esetén
- 12:00-12:20 **Tóth Gergely, Király Péter, Amine Ballaj (ELTE Kémiai Intézet):**
Gauss kernel becslés versus MLR, PLS, ANN...

12:20-13:20 **Ebédszünet**

Fehérjemodellezési szekció

Üléselnök: Bajusz Dávid

- 13:20-13:40 **Kiss-Szemán Anna, Orgován Zoltán, Stráner Pál, Jákli Imre, Perczel András, Harmat Veronika, Karancsiné Menyhárd Dóra (MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):**
Acil-aminoacil peptidáz: krio-EM vizsgálatok és számítások
- 13:40-14:00 **Sarkar, Arijit; Mitra, Argha; Borics Attila (SZBK Biokémiai Intézet):**
Konzervált motívumok korreláló mozgásainak és az agonista ligandumok kötési orientációjának szerepe a G fehérje-kapcsolt receptorok aktivációs mechanizmusában
- 14:00-14:20 **Hegedűs Tamás (SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet):**
ABC transzmembránfehérje szerkezetek sűrűjében
- 14:20-14:30 **Szünet**

Molekuladinamikai szekció

Üléselnök: Ferenczy György G.

- 14:30-14:50 **Bogár Ferenc, Krekic Szilvia, Horváth János, Násztor Zoltán, Mérő Márk, Dér András, Heiner Zsuzsanna (SZTE Orvosi Vegytani Intézet, MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, Humbolt Egyetem SALSA, SZBK Biofizikai Intézet, Max Born Intézet):**
Királis vízszerkezet polipeptidek közelében: Molekuladinamika alapú vibrációs összefrekvencia spektrum számítások
- 14:50-15:10 **Fazekas Zsolt, Karancsiné Menyhárd Dóra, Perczel András (MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):**
Az Omicron SARS-CoV2 RBD:ACE2 komplex vizsgálata MD szimulációval
- 15:10-15:20 **Szünet**

Kemometria II

Üléselnök: Tóth Gergely

- 15:20-15:40 **Rác Anita, Mihalovits Levente, Bajusz Dávid, Ramon Alain Miranda-Quintana, Héberger Károly (TTK Plazmakémiai Kutatócsoport és Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, University of Florida Department of Chemistry and Quantum Theory Project):**
Molekuladinamikai szimulációk mintavételezése többszörös hasonlósági metrikákkal
- 15:40-16:00 **Ipkovich Ádám, Héberger Károly, Abonyi János (MTA-PE „Lendület” Komplex Rendszereket Monitorozó Kutatócsoport, TTK Plazmakémiai Kutatócsoport):**
Többdimenziós adatok jól érthető megjelenítése: Rangszámkülönbségek abszolút értékeinek összege és párhuzamos koordináták alapján
- 16:00-16:20 **Rákosa Rita, Németh Zsolt István (Ingvesting Team Kft., Spektrometria Laboratórium, Sopron):**
Egybevágósági koncepció spektrumok összehasonlítására
- 16:20-16:40 **Németh Zsolt István, Németh Katalin Emma, Rákosa Rita (Ingvesting Team Kft., Spektrometria Laboratórium, Sopron):**
ATR mérési mód hatása a műanyagok FT-IR spektrumára
- 16:40-16:50 **Szünet**

Gyógyszertervezési szekció I**Üléselnök: Hetényi Csaba**

- 16:50-17:10 **Szalai Tibor Viktor, Petri László, Péczka Nikolett, Bajusz Dávid, Keserű György Miklós (TTK Szerves Kémiai Intézet, Gyógyszerkémiai Kutatócsoport):**
STAT3 inhibitorok azonosítása virtuális szűréssel
- 17:10-17:30 **Mihalovits Levente M., Ferenczy György G., Keserű György Miklós (TTK Szerves Kémiai Intézet, Gyógyszerkémiai Kutatócsoport):**
Oxatiazolon vázú kovalens immunoproteaszóma inhibitorok mechanizmus és szelektivitás vizsgálatai
- 17:30-17:50 **Hőgye Fanni, Balogh Álex Kálmán, Illyés Tünde Zita, Timári István, Szilágyi László, Kövér E. Katalin, Fehér Krisztina (DE Szerves Kémiai Tanszék, DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MTA-DE Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport):**
In silico exploration of novel sulphur and selenium containing ligands binding to human Galectin-3
- 17:50-18:10 **Resch Vivien, Traj Péter, Mernyák Erzsébet, Paragi Gábor (SZTE Orvosi Vegytani Intézet, SZTE Szerves Kémiai Tanszék, MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, PTE Fizika Intézet):**
Kötési szabadenergia számítások tubulin komplexekben
- 19:00- Szimpózium-vacsora

2022. június 3., péntek**Kemometria szekció III****Üléselnök: Rajkó Róbert**

- 9:00-9:20 **Daróczi Csilla, Barna Renáta, Papp Gábor, Elek János (Science Port, Debreceni Egyetem):**
Hidrogén-karbonát – formiát átalakulás konverziójának koncentrációfüggetlen vizsgálata Raman spektroszkópiás módszerrel
- 9:20-9:40 **Csontos Máté, Tatiana Damasceno, Alexa Lóránt, Elek János (Science Port, Debreceni Egyetem):**
Már megint a sörök, avagy tradicionális módszerrel mért minősítő paraméterek és a NIR spektrumok összefüggésének vizsgálata
- 9:40-10:00 **Elek János, Novarian Budisetyowati (Science Port, Debreceni Egyetem):**
Gyors diagnosztikai módszer kidolgozása almalevek minőségromlásának vizsgálatára
- 10:00-10:10 Szünet

Gyógyszertervezési szekció II**Üléselnök: Keserű György Miklós**

- 10:10-10:30 **Hetényi Csaba, Horváth István, Szél Viktor, Zsidó Balázs Zoltán, Börzsei Rita (PTE Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet, Farmakoinformatikai Tanszék):**
Szükségesek-e az explicit vízmolekulák a célmolekula-ligandum kötési affinitások számításánál?
- 10:30-10:50 **Zsidó Balázs Zoltán, Börzsei Rita, Szél Viktor, Hetényi Csaba (PTE Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet, Farmakoinformatikai Tanszék):**
HydroDock protokoll célpont-ligandum dokkoláshoz explicit vízmolekulákkal

10:50-11:10 **Dormán György (TargetEx Kft.):**
In silico fehérje-célpont azonosítás: 2D hasonlósági keresés milliós nagyságrendű bioaktivitást és fehérje kölcsönhatást tartalmazó adatbázisokban

11:10-11:20 **Szünet**

Elméleti kémiai szekció II

Üléselnök: Bogár Ferenc

11:20-11:40 **Fehér Péter Pál, Madarász Ádám, Stirling András (Természettudományi Kutatóközpont):**
Többszintű spektrumszimuláció a nukleáris kvantum effektus figyelembevételével

11:40-12:00 **Paragi Gábor (MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, PTE Fizika Intézet):**
Tetramerek energia dekompozíció analízise implicit oldószerben

12:00-12:20 **Goldschmidtné Gőz Viktória, Varga István, Jákli Imre, Dürvanger Zsolt, Harmat Veronika, Pintér István, Schlosser Gitta, Perczel András (MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):**
Hexóزامin epimerek ultrastabil gyűrű konformációinak vizsgálata elméleti és ciklikus ion mobilitás tömegspektrometriai módszerekkel

12:20-12:40 **Oláh Julianna, Joseph Kfoury, Mohácsi Zsombor, Decsi Balázs, Balogh György Tibor (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, SZTE Gyógyszerhatástani és Biofarmáciai Intézet):**
Klorokvin és hidroxiklorokvin oxidatív metabolizmusának biomimetikus modellezése

12:40-12:50 **Zárszó**

Üdvözlettel,

Dr. Lopata Antal

a QSAR és Modellezési Szakcsoport elnöke