

# 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 2023 szimpóziumra.

## Helyszín és időpont:

MTA SZAB székház (Szeged, Somogyi u. 7.)  
2023. május 18. 10:00 órától május 19. 12:50 óráig

## A szimpózium programja:

**2023. május 18., csütörtök**

10:00-10:10    **Megnyitó**

### Elméleti kémiai szekció I

Üléselnök: Paragi Gábor

- 10:10-10:30    **Tóth Petra, Szűcs Tímea és Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**  
*A Cl + CH<sub>3</sub>CN reakció absztrakciós és szubsztitúciós útvonalainak nagypontosságú kvantumkémiai feltérképezése*
- 10:30-10:50    **Sipos Barnabás Iván, Gruber Balázs és Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**  
*Az O(<sup>3</sup>P) + CH<sub>4</sub> reakció dinamikájának vizsgálata egy új ab initio globális potenciálisenergia-felületen*
- 10:50-11:10    **Cangtao Yin, Gábor Czakó (MTA-SZTE Lendület Computational Reaction Dynamics Research Group, Interdisciplinary Excellence Centre and Department of Physical Chemistry and Materials Science, Institute of Chemistry, University of Szeged):**  
*Automated full-dimensional potential energy surface development and quasi-classical dynamics for the HX + C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> (X = Br, I) reactions*

11:10-11:20    **Szünet**

### Gyógyszertervezési szekció

Üléselnök: Bajusz Dávid

- 11:20-11:40    **Rácz Anita, Vincze Anna, Balogh György Tibor (TTK Plazmakémiai Kutatócsoport, BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék):**  
*Klasszikus és gépi tanulós modellek gyógyszervegyületek felszívódásának előrejelzésére*

- 11:40-12:00 **Biskup Dóra (PTE ÁOK Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet):**  
*Szomatosztatin sst4 receptoron ható agonisták in silico vizsgálata*
- 12:00-12:20 **Börzsei R, Bayarsaikhan B, Zsidó BZ, Lontay B, Hetényi Cs (PTE ÁOK Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet):**  
*A protein-arginin-metil-transzferáz-5 enzim foszforilációjának szerkezeti hatásai a H4 hisztonhoz való kötődésére*

12:20-13:20 **Ebédpszünet**

**Kemometria szekció I** **Üléselnök: Németh Zsolt István**

- 13:20-13:40 **Héberger Károly (TTK Anyag és Környezetkémiai Intézet):**  
*A gépi tanulás állatorvosi lova*
- 13:40-14:00 **Daróczi Csilla, Elek János (Science Port Kft.):**  
*Raman spektroszkópiás reakciókövetés, kiindulási koncentrációtól független konverzió kalibráció*
- 14:00-14:20 **Rajkó Róbert (PTE TTK):**  
*Normalizálás a (bio)kemometriában*
- 14:20-14:40 **Tóth Gergely, Rita Lasfar (ELTE TTK Kémiai Intézet):**  
*Validálás bootstrappal vagy keresztellenőrzéssel?*

14:40-14:50 **Szünet**

**Elméleti kémiai szekció II** **Üléselnök: Bogár Ferenc**

- 14:50-15:10 **Joseph Kfoury, Frank Blockhuys, Julianna Oláh (Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics, University of Antwerp, Department of Chemistry):**  
*Understanding the Effect of First Row Transition Metals on the Structure and Properties of Cyclopentadienyl-stabilized 5,1,3,2,4-Metalladithiadiazoles*
- 15:10-15:30 **Ahmed M. Rozza, Danny E. P. Vanpoucke, Eva-Maria Krammer, Julie Bouckaert, Ralf Blossey, Marc F. Lensink, Mary Jo Ondrechen, Imre Bakó, Julianna Oláh, Goedeke Roos (BME Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Al-Azhar University, Egypt, Ghent University, Belgium, University of Lille, France, Northeastern University, Boston, USA, TTK Institute of Organic Chemistry):**  
*Hydration sphere structure of architectural molecules: polyethylene glycol and polyoxymethylene oligomers*
- 15:30-15:50 **Resch Vivien, Paragi Gábor (SZTE Orvosi Vegytani Intézet, SZTE Elméleti Fizika Tanszék, PTE Fizika Intézet):**  
*Kationok elméleti vizsgálata quadruplex rendszerekben*
- 15:50-16:10 **Fehér Péter Pál, Madarász Ádám, Stirling András (TTK):**  
*Fotokatalizátorok redox erősségének becslése kombinált DFT+ML módszerrel*
- 16:10-16:20 **Szünet**

**Fehérjemodellezési szekció I****Üléselnök: Ferenczy György G.**

- 16:20-16:40 **Kovács Dániel, Bodor Andrea (ELTE Kémiai Intézet, Analitikai és BioNMR Laboratórium, ELTE Hevesy György Kémia Doktori Iskola):**  
*Globuláris és rendezetlen fehérjék jellemzése másodlagos NMR kémiai eltolódás módszerrel és statisztikával: Ca-Ha diszkordancia és a ráépülő eljárások*
- 16:40-17:00 **Pilhál Fruzsina, Jákli Imre, Keszei Ernő, Láng András, Perczel András (ELKH-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport, ELTE Kémiai Intézet, Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium, Fizikai Kémiai Tanszék és Reakciókinetikai Laboratórium):**  
*NG szekvenciát tartalmazó peptidok spontán átalakulásának vizsgálata NMR spektroszkópiai és elméleti módszerekkel*
- 17:00-17:20 **Kálmán Zsófia, Nagy-Kanta Eszter, Gáspári Zoltán (PPKE ITK):**  
*A GKAP és a Homer1 poszttranszkripciós fehérjék és komplexeik szerkezeti modellezése*
- 17:20-17:30 **Szünet**

**Fehérjemodellezési szekció II****Üléselnök: Gáspári Zoltán**

- 17:30-17:50 **Mihalovits Levente M., Kollár Levente, Bajusz Dávid, Damijan Knez, Krištof Božovičar, Imre Tímea, Ferenczy György G., Stanislav Gobec, Keserű György Miklós (TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, University of Ljubljana):**  
*A koronavírus fő proteázának kovalens jelölése heterociklusos tionokkal*
- 17:50-18:10 **Bajusz Dávid, Pándy-Szekeres Gáspár, Takács Ágnes, Elvin de Araujo, Keserű György Miklós (TTK Gyógyszerkémiai Kutatócsoport, University of Toronto Mississauga):**  
*SH2db: online adatbázis és webszerver SH2 fehérjedomén szerkezetekre*
- 19:00- **Szimpózium-vacsora**

**2023. május 19., péntek****Kemometria szekció II****Üléselnök: Tóth Gergely**

- 9:00-9:20 **Németh Zsolt István, Rákosa Rita (Investing Team Kft., Spektrometria Laboratórium, Sopron):**  
*Hibrid FT-IR spektrumok biológiai fluidumok jellemzésére?*
- 9:20-9:40 **Elek János, Csontos Máté (Science Port Kft.):**  
*Úthengerrel a Forma 1-ben, nyerni, de hogyan?*
- 9:40-10:00 **Csontos Máté, Elek János (Science Port Kft.):**  
*Tű a szénakazalban: NIR módszerfejlesztés új típusú élelmiszer-adalékok meghatározására rágcsálótápokból*
- 10:00-10:10 **Szünet**

### Elméleti kémiai szekció III

Üléselnök: Czakó Gábor

- 10:10-10:30 **Kelemen Ádám, Perczel András, Jákli Imre (ELKH-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):**  
*Amid cisz/transz izomerizáció reakcióútjainak feltérképezése*
- 10:30-10:50 **Hollóczki Oldamur (Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék):**  
*Nanoműanyagok és biomolekuláris rendszerek kölcsönhatásának vizsgálata*
- 10:50-11:10 **Krekic Szilvia, Merő Márk, Horváth János, Násztor Zoltán, Dér András, Bogár Ferenc, Heiner Zsuzsanna (School of Analytical Sciences Adlershof, Humboldt-Universität zu Berlin, SZBK Biofizikai Intézet, SZTE Multidiszciplináris Orvostudományok Doktori Iskola, SZTE Fizika Doktori Iskola, Max Born Institute for Nonlinear Optics and Short Pulse Spectroscopy, Berlin, SZTE Orvosi Vegytani Intézet, ELKH-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport):**  
*A PYP adszorpciója hidratált polilizin felületen: Hogyan segítheti a modellezés a vibrációs összefrekvencia spektrum értelmezését?*
- 11:10-11:20 Szünet

### Fehérjemodellezési szekció III

Üléselnök: Keserű György Miklós

- 11:20-11:40 **Tusnady Gábor, Dobson László, Szekeres Levente, Gerdán Csongor, Langó Tamás, Zeke András (TTK Enzimológiai Intézet, Fehérje Bioinformatika Kutatócsoport):**  
*TmAlphaFold adatbázis: Az AlphaFold2 által becsült transzmembrán fehérje szerkezetek értékelése*
- 11:40-12:00 **Fazekas Zsolt, Karancsiné Menyhárd Dóra, Perczel András (ELKH-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):**  
*Aminosav-környezetek összehasonlítása fehérjékben lokális szerkezeti és összetételbeli különbségek alapján*
- 12:00-12:20 **Gadancz Márton, Fazekas Zsolt, Pálffy Gyula, K. Menyhárd Dóra, Perczel András (ELTE Kémiai Intézet, Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium, ELKH-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):**  
*Kofaktor-mentes és kofaktor-kötött K-Ras fehérjeszerkezetek meghatározása NMR adatok alapján parametrizált molekula dinamikai szimulációval*
- 12:20-12:40 **Ötvös Ferenc (SZBK Biokémiai Intézet):**  
*Opioid ligandumok farmakológiai profiljának in silico predikciója*
- 12:40-12:50 Zárszó

Üdvözléssel,

Dr. Lopata Antal

a QSAR és Modellezési Szakcsoport társelnöke