

Az MKE Szerves- és Gyógyszerkémiai Szakosztályának **QSAR és Modellezési Szakcsoportja** és az MTA Szegedi Akadémiai Bizottságának **Kemometria és Molekulamodellezés Munkabizottsága** 2024. június 3-án és 4-én az MTA SZAB Székházban (Szeged, Somogyi u. 7.) rendezi meg a KeMoMo–QSAR 2024 szimpóziumot.

A szimpózium programja:

2024. június 3., hétfő

10:00-10:10 **Megnyitó**

Elméleti kémiai szekció I

Üléselnök: Paragi Gábor

10:10-10:40 **Gruber Balázs (PhD dolgozat bemutató) (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**
Az OH gyök reakcióinak elméleti vizsgálata C_2H_6 , CH_3NH_2 és glicin molekulákkal

10:40-11:00 **Tasi Domonkos Attila, Orján Erik, Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**
Bimolekuláris nukleofil szubsztitúció két lehetséges távozócsoporttal: a F^- + CH_2ClI reakció elméleti vizsgálata

11:00-11:20 **Papp Dóra, Erdei Laura, Gál Dorina, Giricz Anett, Gyimesi Réka, Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**
A központi atom és a távozócsoport hatásának elméleti modellezése S_N2 reakciók dinamikájában

11:20-11:40 **Szünet**

Kemometria szekció I

Üléselnök: Héberger Károly

11:40-12:00 **Rajkó Róbert (Pharmacoidea Kft):**
Numquam ponenda est pluralitas sine necessitate

12:00-12:20 **Tóth Gergely, Benedikti Anna, Karvaly Krisztián (ELTE Kémiai Intézet):**
A kéknylev betegségtől a kémiai adatok double descentjéig

12:20-12:40 **Kemény Sándor, Pusztai Éva (BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék):**
[Tényleg minden varianciaanalízis?](#)

12:40-13:40 **Ebéd-szünet**

Gyógyszertervezési szekció

Üléselnök: Ferenczy György

13:40-14:00 **Kollár Levente, Mihalovits Levente, Bajusz Dávid, Damijan Knez, Simon József, Stanislav Gobec, Keserű György Miklós (HUN-REN TTK, BME VBK, University of Ljubljana):**
Kovalens inhibitorok tervezése gépi tanulással segített fragmens összekötéssel

14:00-14:20 **Szalai Tibor Viktor, Bajusz Dávid, Börzsei Rita, Zsidó Balázs Zoltán, Janez Ilaš, Ferenczy György, Hetényi Csaba, Keserű György Miklós (HUN-REN TTK, PTE, University of Ljubljana):**

Vízmolekulák a kötőzsebben: szerkezet és termodinamika, számítás és kísérlet

- 14:20-14:40 **Krámos Balázs (Richter Gedeon Nyrt, Szerkezetkutatási osztály):**
GABA_A receptor allosztérikus modulátorok: Kötődés, funkcionalitás és FEP számítások
- 14:40-15:00 **Balogh Balázs (SE Szerves Vegytani Intézet):**
Sigma-1 receptor ligandumok vizsgálata számítógépes kémiai módszerekkel
- 15:00-15:20 **Szünet**
- Fehérjemodellezési szekció Üléselnök: Keserű György Miklós
- 15:20-15:40 **Varga Soma, Permi Perttu, Péterfia Bálint, Gáspári Zoltán (PPKE ITK, University of Jyväskylä):**
A Drebrin fehérje magányos alfa-helikális régiójának integrált modellezése
- 15:40-16:00 **Bogár Ferenc, Wéber Edit, Nagymihály Bence, Martinek Tamás (HUN-REN-SZTE Biomimetikus Rendszerek Kutatócsoport, SZTE SZAOK Orvosi Vegytani Intézet):**
A Rad6 fehérje kölcsönhatási felületeinek felderítése foldamer fragmensek dokkolásával
- 16:00-16:20 **Fazekas Zsolt, Karancsiné Menyhárd Dóra, Perczel András (HUN-REN - ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport, ELTE Kémiai Intézet Hevesy György Kémia Doktori Iskola, ELTE Szerkezeti Kémiai és Biológiai Laboratórium):**
Aminosav-környezetek tulajdonságai a LoCoHD metrika fényében
- 16:20-16:40 **Resch Vivien, Rácz Anita, Tóth László, Paragi Gábor, Virok Dezső (SZTE SZAOK Orvosi Vegytani Intézet, HUN-REN TTK, SZTE Számítógépes algoritmusok és Mesterséges Intelligencia Intézet, PTE Fizika Intézet, SZTE Orvosi Mikrobiológiai Intézet):**
Kis peptidek és HLA-A (MHC-I) kölcsönhatásának vizsgálata számítógépes módszerekkel
- 16:40-17:00 **Szünet**
- Elméleti kémiai szekció II Üléselnök: Bogár Ferenc
- 17:00-17:20 **Joseph Kfoury, Weiyang Li, Yann Garcia, Julianna Oláh (Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics, Institute of Condensed Matter and Nanosciences, Molecular Chemistry, Materials and Catalysis (IMCN/MOST), Université catholique de Louvain):**
The Exploration of Spin Crossover Phenomena in Tetrahedral Fe(II) Cage Systems
- 17:20-17:40 **Yang Meng, Julianna Oláh, Zoltán Benkő (Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics):**
Radicals containing Group 15 elements: Stability and reactivity in addition reactions to olefins
- 17:40-18:00 **Kertész Erik, Benkő Zoltán (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):**
Karbének bizmut-trihalogenid komplexeinek számítógépes kémiai vizsgálata
- 18:00-18:20 **Fekete Csilla, Benkő Zoltán (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):**

Egy foszfinkomplex alkil-kloridokkal való reakciójának vizsgálata
kvantumkémiai módszerekkel

19:00- Szimpózium vacsora

2024. június 4., kedd

Elméleti kémiai szekció III

Üléselnök: Czakó Gábor

- 9:00-9:20 **Mándi Attila, Kovács Tibor, Barta Roland Albert, Hohmann Judit, Borbás Anikó, Schaff Gabriella, Rimóczi Aliz, Vasas Andrea, (DE Szerves Kémiai Tanszék, SZTE Farmakognóziái Intézet, DE Gyógyszerészi Kémiai Tanszék):**
 ^{13}C , ^1H és ^{15}N -NMR paraméter fejlesztés természetes és szintetikus származékok szerkezet-meghatározásához
- 9:20-9:40 **Hetényi Csaba, Szél Viktor, Bavarsaikhan Bavartsetseg, Biskup Dóra, Zsidó Balázs Zoltán, Börzsei Rita (PTE ÁOK Farmakológiai és Farmakoterápiái Intézet, Farmakoinformatikai Tanszék):**
Gyors SQM a végpontokra: a jövő pontozófüggvényei?
- 9:40-10:00 **Bakó Imre (HUN-REN TTK):**
Lenni vagy nem lenni: a H-kötés
- 10:00-10:20 **Kelemen Ádám András, Perczel András, Jákli Imre (HUN-REN - ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport, ELTE Kémiai Intézet Hevesy György Kémia Doktori Iskola, ELTE Szerkezeti Kémiai és Biológiai Laboratórium):**
Amid cisz-transz izomerizáció számolása variációs kvantumsajátérték (VOE) módszerrel kvantumszámítógép szimuláció során
- 10:20-10:40 **Szünet**
- Kemometria szekció II
- 10:40-11:00 **Elek János (Science Port Kft.):**
"Egy új remény", reflexiós UV spektroszkópia alkalmazása rágcsáló etetési toxikológiai vizsgálatok analitikai kihívásainak megoldására
- 11:00-11:20 **Ipkovich Ádám, Héberger Károly, Sebestyén Viktor, Abonyi János (HUN-REN-PE Komplex Rendszerek Monitoring Kutatócsoport, HUN-REN TTK Anyag és Környezetkémiai Intézet, Pannon Egyetem Fenntarthatósági Megoldások Kutatási Laboratórium):**
Rangszámkülönbségek összege hasznossági függvényen alapuló általánosítása (uSRD), és az üvegházhatású gáz kibocsátás országokként történő elemzése
- 11:20-11:40 **Rácz Anita, Imre Attila, Dombi Gergely, Resch Vivien, Klébert Szilvia (HUN-REN TTK, SOTE ETEK, SOTE GYKI, SZTE OVI):**
A konszenzus ereje a többváltozós klasszifikációs és regressziós modellezésben
- 11:40-12:00 **Gere Attila, Szakál Dorina, Xu Cao, Abdul Hannan Zulkarnain (MATE Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet, Árukezelés, Kereskedelem, Ellátási Lánc és Érzékszervi Minősítési Tanszék):**
Szerelem első látásra, avagy tényleg az első pillantás a legfontosabb?
- 12:00-12:10 **Zárszó**

Üdvözlettel,
Dr. Lopata Antal
a QSAR és Modellezési Szakcsoport társelnöke