

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 2026 szimpóziumra.

Helyszín és időpont:

MTA SZAB székház (Szeged, Somogyi u. 7.)
2026. május 21. 10:00 órától május 22. 12:35 óráig

A szimpózium programja:

2026. május 21., csütörtök

10:00-10:10 **Megnyitó**

Elméleti kémiai szekció I

Üléselnök: Paragi Gábor

10:10-10:25 **Papp Dóra, Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**
Dinamikai izotópeffektus egy S_N2 reakcióban

10:25-10:40 **Rudner Csaba, Gruber Balázs, Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**
A $Cl + C_2H_3I$ reakcióutak nagy pontosságú ab initio feltérképezése

10:40-10:55 **Dékány Attila Ádám, Molnár Balázs József, Czakó Gábor (MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék):**
Az analitikus potenciál-alapú és a direkt dinamika módszerek összehasonlító vizsgálata a $F^- + SiH_3I$ reakció esetén

10:55-11:10 **Jákli Imre, Kelemen Ádám András, Perczel András (HUN-REN-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):**
Amid és amidin kölcsönhatások és foldamerek összehasonlítása

11:10-11:30 **Szünet**

Fehérjemodellezési szekció I

Üléselnök: Keserű György Miklós

11:30-11:45 **Tóth Dániel, Dudás Bálint, Maria A. Miteva, Balog Erika (Richter Gedeon Nyrt, SE Biofizika és Sugárbiológiai Intézet, Inserm U1268 MCTR, CiTCoM UMR 8038 CNRS - Université Paris Cité, Pharmaceutical Faculty of Paris, Laboratory of Computational Biology, National Heart, Lung, and Blood Institute, National Institutes of Health):**
*A *SULT* enzimek működésének és allosztérikus kommunikációjának feltárása szimulációs módszerekkel*

- 11:45-12:00 **Fazekas Zsolt, Bódy István, Tar-Pálfi Helga, Papp Dávid, Virág Dávid, Turiák Lilla, Pozsonyi Zoltán, Karancsiné Menyhárd Dóra, Perczel András (HUN-REN-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport, ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium):**
Hazai mutáns transztiretin tetramerizációjának vizsgálata molekuladinamika szimulációkkal
- 12:00-12:15 **Farkas Fanni, Kálmán Zsófia, Péterfia Bálint, Batta Gyula, Gáspári Zoltán (PPKE ITK, DE TTK):**
A posztiszinaptikus Homer1 fehérje EVH1 doménjének szerkezeti-dinamikai elemzése
- 12:15-13:15 **Ebédszünet**

Kemometriai szekció I **Üléselnök: Elek János**

- 13:15-13:30 **Petrovics Zoltán, Jaksáné Borbás Enikő, Nagy Zsombor Kristóf, Nagy Brigitta, Kemény Sándor, Pusztai Éva (BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék):**
Hatóanyagtartalom-egységesség értékelése Folyamatfelügyelő- és Analizáló Technológia mellett: esettanulmány a mintaelemszám meghatározására az Európai Gyógyszerkönyv tükrében
- 13:30-13:45 **Laki Anna, Kemény Sándor, Pusztai Éva (BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék):**
Analitikai módszerek pontosságának és precizitásának vizsgálata az Amerikai Gyógyszerkönyv <1210>-es fejezete szerint
- 13:45-14:00 **Nagy Sára, Rácz Anita (HUN-REN TTK):**
A csoport-kiegyenlítési stratégiák hatása az ADME-Tox adatkészletek gépi tanulós osztályozására
- 14:00-14:15 **Klébert Szilvia, Sebestény Zoltán, Czégény Zsuzsanna, Rácz Anita (HUN-REN TTK):**
IR spektroszkópia és gépi tanulás kombinációja lignocellulóz alapú biomasszák osztályozására és összetétel-meghatározására
- 14:15-14:35 **Szünet**

Gyógyszertervezési szekció I **Üléselnök: Bajusz Dávid**

- 14:35-14:50 **Perjési Pál, Bognár Gábor, Pintér Zoltán (PTE GYTK Gyógyszerészi Kémiai Intézet):**
Szerkezet-hatás és szerkezet-reaktivitás vizsgálatok kalkonok és gyűrűs kalkon analógok körében
- 14:50-15:05 **Resch Vivien Erzsébet, Hegedűs Zsófia, Wéber Edit, Mernyák Erzsébet, Paragi Gábor (SZTE SZAOK Orvosi Vegytani Intézet, PTE Fizikai Intézet, SZTE GYTK Farmakognóziái Intézet):**
Aldo-keto reduktáz és szérum albumin fehérjékhez kötődő kismolekulák számítógépes és kísérletes vizsgálata
- 15:05-15:20 **Hoffka Gyula, Tózsér József, Mótyán János András (DE ÁOK Biokémiai és Molekuláris Biológiai Intézet, Department of Chemistry, Lund University):**
Az aktív hely protonáltsági állapotának szerepe a SARS-CoV-2 fő proteáz reakciómechanizmusában
- 15:20-15:40 **Szünet**

Elméleti kémiai szekció II

Üléselnök: Hollóczki Oldamur

- 15:40-15:55 **Noor Aldeeb, Zsolt Benedek, Julianna Oláh (Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics, MTA–ELTE Lendület "Momentum" New Qubit Research Group):**
Quantum Chemical Insight into Redox cycling of estrogen
- 15:55-16:10 **Luo Sheng, Julianna Oláh (Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics):**
Ammonia as a carbon-free energy resource: catalytic activity of iron complexes
- 16:10-16:25 **Meng Yang, Zoltán Benkő, Julianna Oláh (Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics):**
Electronic Structure and Spin-State Energetics in Copper-Catalyzed Aziridination Mediated by Non-Innocent Ligands: A DFT Study
- 16:25-16:40 **Kégl Tamás (PTE TTK Általános és Szervetlen Kémia Tanszék):**
Ekvivariáns hálózatok és Δ -tanulás: metadinamikai szimulációk átmenetifém-komplexeken
- 16:40-17:00 **Szünet**

Fehérjemodellezési szekció II

Üléselnök: Gáspári Zoltán

- 17:00-17:15 **Illés Gergő, Minorics Nóra Dalma, Paragi Gábor (PTE Fizikai Intézet, SZTE Orvosi Vegytani Intézet, SZTE Elméleti Fizikai Tanszék):**
Töltés-transzfer folyamatok vizsgálata módosított kriptokróom fehérjékben
- 17:15-17:30 **Hoffka Gyula, Bruno Di Geronimo, Shina Caroline Lynn Kamerlin (DE ÁOK Biokémiai és Molekuláris Biológiai Intézet, Department of Chemistry, Lund University, School of Chemistry and Biochemistry, Georgia Institute of Technology, School of Chemical and Biomolecular Engineering, Georgia Institute of Technology):**
Az arilmalonát-dekarboxiláz sztereoszelektivitásának molekuláris háttere: QM/MM/MD metadinamikai vizsgálatok
- 17:30-17:45 **Gereben Orsolya, Hunyadi Péter, Hegedűs Tamás (SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet):**
Transzmembrán fehérjék kölcsönhatásai és működésük membránkörnyezet-függő szabályozása
- 19:00- **Szimpózium-vacsora**

2026. május 22., péntek**Elméleti kémiai szekció III**

Üléselnök: Benkő Zoltán

- 9:00-9:15 **Szabó Boglárka, Hollóczki Oldamur (DE Fizikai Kémiai Tanszék):**
Nanoműanyag modellek építése
- 9:15-9:30 **Varenicja Maxim, Hollóczki Oldamur (DE Fizikai Kémiai Tanszék):**
Polimerek kölcsönhatásai nukleinsavakkal
- 9:30-9:45 **Minorics Nóra Dalma, Illés Gergő, Paragi Gábor (PTE Fizikai Intézet, SZTE Orvosi Vegytani Intézet, SZTE Elméleti Fizikai Tanszék):**
Kooperatív halogén kötések számítógépes vizsgálata

9:45-10:05 Szünet

Gyógyszertervezési szekció II **Üléselnök: Bogár Ferenc**

10:05-10:20 **Szalai Tibor Viktor, Bajusz Dávid, Keserú György Miklós, Sungwoo Cho, Farida El Gaamouch, Moustafa Gabr (HUN-REN TTK, Weill Cornell Medicine):**
Gépi agy az emberi agyéért: gépi tanulással elősegített virtuális szűrés az Alzheimer-célpont TREM2 fehérjére

10:20-10:35 **Sipos-Szabó Levente, Bajusz Dávid, Balogh György Tibor, Keserú György Miklós (HUN-REN TTK, Semmelweis Egyetem):**
pKa számítás neurális hálókkal: modellek összehasonlítása egy nagy, nyilvános adathalmazon

10:35-10:55 Szünet

Kemometriai szekció II **Üléselnök: Rácz Anita**

10:55-11:10 **Kovács Dániel (NNGYK Gyógyszerkémiai és Technológiai Laboratórium, ELTE Hevesy György Kémia Doktori Iskola):**
Szemelvények alkalmazott mérési bizonytalanság számításokból

11:10-11:25 **Elek János, Kalmár József (Science Port Kft, DE TTK Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):**
Részecskeszám becslés, és oligomerizáció spektroszkópiás vizsgálata

11:25-11:45 Szünet

Elméleti kémiai szekció IV **Üléselnök: Czakó Gábor**

11:45-12:00 **Kertész Erik, Benkő Zoltán (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):**
P, C, P-Sn-kelátkomplexek koordinációs tulajdonságainak vizsgálata számításos kémiai módszerekkel

12:00-12:15 **Virág Bogdán, Horváth Ádám, Benkő Zoltán (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):**
Foszfininek alkilezése és a keletkező kationok tulajdonságai: DFT számítások

12:15-12:30 **Simon Kevin Zs., Béres Kende A., Papp Nándor, K. Menyhárd Dóra, Kótai László (ELTE Hevesy György Kémia Doktori Iskola, ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium, HUN-REN TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet, ELTE Analitikai és BioNMR Laboratórium,):**
A Tc-PYP nyomjelző szerkezeti modellezésének legérdekesebb mozzanatai

12:30-12:35 Zárszó

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