



Magyar NMR Munkabizottság

MTA Kémiai Tudományok Osztálya NMR Munkabizottsága

MKE Analitikai Szakosztály NMR Szakcsoportja

2016. évi Munkabizottsági ülés

az MTA Debreceni Területi Bizottságának (DAB) székházában
(4032 Debrecen, Thomas Mann u. 49.)

Május 20. péntek

- 11:45- **Ebéd a konferencia helyszínén (előzetes egyéni kérésre)**
12:50 **Lunch at conference site (upon earlier, individual request)**
- chair:** *Andrea Bodor*
- 12:55 **Megnyitó / Opening**
Csaba Szántay
- 13:00 **Membrane-associated GT-B glycosyltransferases - the role of lipids**
Lena Mäler
Stockholm University
- 13:30 **NMR and MD investigations of peptidoglycan-based immunostimulators**
*Fernando Chain, Rosanna Ribic, Srdjanka Tomic, Jose C. Martins, Katalin E. Kövér, Krisztina Fehér**
Ghent University, University of Zagreb, Debrecen University
- 14:00 **Multinuclear NMR study of the structure and ligand exchange dynamics of uranium(VI) complexes**
Zoltán Szabó
Royal Institute of Technology (KTH), Stockholm
- 14:30 ...
Daniel Mathieu
Bruker BioSpin GmbH
- 15:00 **Conformations of Clothianidine - Theory and Experiment**
Matthias Michael Jank, Michael Schindler, Edmund Beck*
Bayer Cropscience Division
- 15:30 **COFFEE BREAK**

- chair:** *Zoltán Gáspári*
- 15:50 **Latest News from JEOL**
*Keisuke Okayama**, *Satoshi Sakurai**
JEOL (EUROPE)SAS
- 16:20 **100+ kHz MAS for natural abundance samples**
Yusuke Nishiyama
JEOL (EUROPE)SAS
- 16:50 **Homonuclear and heteronuclear Tl-Tl NMR spin-spin coupling as a structural tool in solution**
*T. Fodor¹, W. W. Ayass², L. Zékány¹, A. Bodor³, U. Kortz² and I. Tóth^{*1}*
¹University of Debrecen, Debrecen, Hungary; ²Jacobs University, Bremen, Germany;
³Eötvös University, Budapest, Hungary
- 17:20 **Pulsed Field Gradient NMR with home-made probehead**
Dávid Iván
Budapest University of Technology and Economics, Budapest, Hungary
- 17:30 **Utazás a Tuba-tanyára** (indulás a konferencia helyszínéről, bérelt busszal)
- 18:00- **Vacsora és mulatás a Tuba-tanyán** (a Bruker Biospin szponzorálásával)

Május 21. szombat

- chair:** *Szakács Zoltán*
- 9:00 **A PSD-95 PDZ1-2 tandem belső mozgásainak sokaság alapú molekuladinamikai szimulációja NMR-es paraméterekkel mint külső kényszerfeltételekkel**
*Kovács Bertalan**, *Gáspári Zoltán*
Pázmány Péter Katolikus Egyetem
- 9:15 **Frusztrált Lewis párok - frusztrált NMR**
*Domján Attila**, *Szabó Márk*, *Kovács Benjámín*, *Dorkó Éva*, *Soós Tibor*
MTA Természettudományi Kutatóközpont
- 9:35 **Érzékenységnövelt többkvantumgerjesztéses SFAM-MQMAS NMR kísérlet kifejlesztése**
*Rohonczy János**, *Koczor Bálint*
Eötvös Loránd Tudományegyetem
- 9:55 **Fehérje elegyek antitest-mediált 15N-GS STD vizsgálata**
*Hetényi Anasztázia^{*1}*, *Hegedűs Zsófia²*, *Monostori Éva³*, *Kövér Katalin⁴*, *Martinek A. Tamás²*
¹Szegedi Tudományegyetem ÁOK; ²Szegedi Tudományegyetem GYTK; ³MTA Szegedi Biológiai Központ; ⁴DET és TKKI
- 10:10 **A hőmérséklet-kalibráció buktatói: rejtett paraméterek értelmezése hőátadási modell segítségével**
*Sedyó Inez**, *Rohonczy János*
Eötvös Loránd Tudományegyetem

- 10:25 **A foszforiláció szerepe a nemizom-miozinok nehézláncának szabályozásában**
Pálfy Gyula, Ecsedi Péter, Nyitray László, Bodor Andrea
Eötvös Loránd Tudományegyetem
- 10:40 **Kávészünet**
- chair:** *Martinek Tamás*
- 11:00 **A maradékos osztás (spectral aliasing) alkalmazása egy meglepő vindolin trimer szerkezetmeghatározására**
Szigetvári Áron
Richter Gedeon Nyrt.
- 11:15 **Lusta Dick megmenekül - avagy az apoptózis egy kulcsfehérjéjét kiütve az egér zsírlerekódásokat növeszt. Mágneszettség-átviteli képalkotás Cyclofilin D-génkiütött egereken**
Vranesics Anett, Berente Zoltán*
Pécsi Tudományegyetem
- 11:30 **Érdekes átrendeződési reakciók Mo- és W-alapú metatézis katalizátorokon**
Dubrovay Zsófia és Tóth Flórián**
Ximo Hungary Kft.
- 11:50 **A gasztrotropin szabad és kötött állapotú dinamikájának vizsgálata kísérleti adatokat felhasználó molekuladinamikai számításokkal**
Harmat Zita, Szabó András, Gáspári Zoltán*
Pázmány Péter Katolikus Egyetem
- 12:05 **^1H - ^1H távolságok pontosabb mérése a ZQS off-rezonancia ROESY módszerrel: validálás és alkalmazás merev vázú molekulákkal**
Boros Sándor, Batta Gyula*
ViChem Kft.; Debreceni Egyetem
- 12:20 **Fehérjék az NMR mérlegen: mennyire lehet kvantitatív?**
Hadháziné Raics Mária, Gyöngyösi Tamás, Timári István, Fizil Ádám, Batta Gyula, Kövér Katalin*
Debreceni Egyetem
- 12:35 **Ebéd a konferencia helyszínén (a JEOL Europe SAS támogatásával)**
- 13:30 **Szakmai kvízzjáték**
Diszkussziók
Meglepetés
- chair:** *Tőke Orsolya*
- 14:45 **Node teljesül-e a NOE és vajon sztereospecifikus-e?**
Gáspári Zoltán
Pázmány Péter Katolikus Egyetem

- 15:00 **A p53-S100A4 kölcsönhatás – hogyan jellemezhetjük NMR spektroszkópia segítségével?**
Dudás Erika^{*1}, *Sebák Fanni*², *Ecsédi Péter*¹, *Gógl Gergő*¹, *Bodor Andrea*¹, *Nyitrai László*¹
¹Eötvös Loránd Tudományegyetem; ²Semmelweis Egyetem
- 15:15 **Mit mondhat el egy fehérjéről az NMR, SAXS, krioporozimetria együttese?**
*Dudás Erika*¹, *Wacha András*², *Bányai István*³, *Bóta Attila*², *Bodor Andrea*^{*1}
¹Eötvös Loránd Tudományegyetem; ²MTA TTK; ³Debreceni Egyetem
- 15:30 **Biológiailag jelentős aszparaginhoz köthető átalakulás kinetikai és termodinamikai jellemzői**
András Láng^{*}, *Kata Enyedi*, *Gábor Mező*, *András Perczel*
Eötvös Loránd Tudományegyetem
- 15:45 **Egy új antifungális fehérje (sfPAFB) szerkezete**
Ádám Fizil^{*1}, *Doris Bratschun-Khan*², *Dorottya Hajdu*¹, *Florentine Marx*², *Gyula Batta*¹
¹Debreceni Egyetem; ²Innsbruck Medical University, Austria
- 16:00 **"Aki a kicsit nem becsüli...": ¹H-NMR 20 Megahertz-en**
Bányai István
Debreceni Egyetem
- 16:15 **Zárszó, hazautazás**