

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 2013 szimpóziumra.

Helyszín és időpont:

MTA SZAB Székház (Szeged, Somogyi u. 7.)

2013. április 29. 10:00 órától április 30. 12:30 óráig

A szimpózium programja:

Megnyitó

2013. április 29. 10:00-10:10

Elméleti kémiai szekció

2013. április 29. 10:10-11:30 *Üléselnök: Csizmadia Imre*

Kristyán Sándor (MTA TTK Molekuláris Farmakológiai Intézet):

Lépték korrekt hatványsoros funkcionálokkal történő variációs számítás elmélete molekulák alap energia állapotának és elektronsűrűségének direkt számolására az elektronikus Schrödinger egyenlet felhasználásával

Szilvási Tibor, Benedek Zsolt, Veszprémi Tamás (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):

Molekulaszabászat. Hexaszilabenzol, a szilíciumkémia szent grálja

Krámos Balázs, Oláh Julianna (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):

A rejtélyes C-C hasadási lépés vizsgálata a humán aromataz katalitikus ciklusában

Kelemen Zsolt, Nyulászi László (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):

Hetero-Breslow-analógok – A foszfor esete

10 perc szünet

Kemometriai szekció

2013. április 29. 11:40-13:00 *Üléselnök: Rajkó Róbert*

Héberger Károly (MTA TTK Anyag és Környezatkémiai Intézet):

Előrebecslési modellek, számítási módszerek és indikátorok rangsorolása és csoportosítása

Molnár László (NanGenex Kft.):

Diszkriminációs módszerek használata szilárd gyógyszerformulák vizsgálatában

Németh Zsolt István (Nyugat-magyarországi Egyetem, Kémiai Intézet):
Korrelációk a növény és a környezet kölcsönhatásában

Herke Zoltán, Cserny Tibor, Magyar Balázs, Németh Zsolt István (Nyugat-magyarországi Egyetem, Kémiai Intézet):
Enzimkinetikai adatsorok feldolgozása korrelációs és főkomponens elemzési módszerekkel

Ebédszünet

Molekuladinamikai szekció
2013. április 29. 14:00-15:00 *Üléselnök: Körtvélyesi Tamás*

Gáspári Zoltán (PPKE ITK):
NMR-adatokon alapuló dinamikus fehérjeszerkezeti sokaságok: fejlesztések és alkalmazások

Kiss Dóra Judit, Tóth Gergely (ELTE Fizikai Kémiai Tanszék):
Tudhatjuk-e előre melyik vízmolekula párolog el?

Farkas Ödön, Polgár Tímea, Kalászi Adrián, Antal L., Imre G., Szabó Miklós (ELTE TTK Szerves Kémiai Tanszék, ChemAxon Kft.):
Konformáció és konformer keresés részlegesen hűtött dinamikai szimuláció (Cool Dynamics) segítségével

10 perc szünet

Elméleti kémiai szekció
2013. április 29. 15:10-16:50 *Üléselnök: Ferenczy György*

Mándi Attila, Antus Sándor, Guo Yue-Wei, Ye Yang, Zhang Wen, Li Dehai, Zhang Changsheng, Proksch Peter, Kurtán Tibor (DE TTK Szerves Kémiai Tanszék, Debrecen, Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Sciences, Shanghai, Research Center for Marine Drugs, Second Military Medical University, Shanghai, Ocean University of China, Qingdao, South China Sea Institute of Oceanology, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou, Heinrich-Heine-Universität, Düsseldorf):
Természetes származékok ECD vizsgálata során felmerült rendhagyó esetek

Daru János, Stirling András (MTA TTK):
Új eljárás reakciókinetikai állandók számítására egyensúlyi szimulációkból

Jákli Imre, Svend J. Knak Jensen, Csizmadia Imre, Perczel András (ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium, MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):
Konformációs tulajdonságok grafikus reprezentációja a potenciális-energia felület topológiája szerint

Hudáky Ilona, Juhász György, Perczel András (ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium, MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport):
 β -aminosav és cukoraminosav modellek DFT konformációs elemzése

Komáromi István, Tóth László, Fekete Attila (MTA-DE Vascularis Biológiai, Thrombosis és Haemostasis Kutató Csoport, DE OEC Klinikai Kutató Központ):

Empirikus erőter paraméterek becslése kvantumkémiai számításokból

10 perc szünet

Gyógyszertervezési és molekulamodelllezési szekció

2013. április 29. 17:00-18:00 *Üléselnök: Lopata Antal*

Polgár Tímea (ChemAxon Kft.):

A gyógyszerkutatás új kihívásai modellező szemmel

Gellért Ákos (MTA ATK Mezőgazdasági Intézet):

Biológiailag aktív füst vegyületek kötődésének vizsgálata egy újonnan felfedezett növényi hormon receptoron

Bánóczi Gergely, Bata Zsófia, Hornyánszky Gábor, Poppe László (BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék):

Aromás aminosav C-N-liáz és 2,3-aminomutáz enzimek vizsgálata

Kerekasztalbeszélgetés

2013. április 29. 18:00-18:40

A kemometria helye a gyógyszerkutatásban

Felkért hozzászóló: Tarcsay Ákos (Richter Gedeon Nyrt.)

Polarizációs erőter a molekuladinamikában. Szükséges-e (mikor), lehetséges-e (hogyan)?

Felkért hozzászóló: Ferenczy György (MTA-SE Molekuláris Biofizikai Kutatócsoport)

Szimpózium vacsora

2013. április 29. 19:00

Kemometriai szekció

2013. április 30. 9:00-10:00 *Üléselnök: Héberger Károly*

Rácz Anita, Elek János, Papp Gábor (Debreceni Egyetem Fizikai Kémia Tanszék, Science Port Kft.):

Kérdések pálinkák infravörös spektroszkópiás elemzése körül

Farkas Attila, Firkala Tamás, Vajna Balázs, Marosi György (BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék):

Felületerősített Raman kémiai térképezés MCR-ALS módszerrel történő alkalmazása nyomnyi mennyiségű hatóanyag vizsgálatára

Rajkó Róbert (SZTE Folyamatmérnöki Intézet):

Ki CART-ot ránt CART által vész el?

10 perc szünet

Molekuladinamikai szekció

2013. április 30. 10:10-11:10 *Üléselnök: Keserű György*

Ferenczy György (MTA-SE Molekuláris Biofizikai Kutatócsoport):

Erő vezérelt molekuladinamika; Módszertani tanulmányok és kezdeti eredmények

Balog Erika (Semmelweis Egyetem Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet):

Alloszterikus jelátadás útja a humán foszfoglicerát kinázban

Bajusz Dávid, Muszbek László, Komáromi István (MTA-DE Vascularis Biológiai, Thrombosis és Haemostasis Kutató Csoport, DE OEC Klinikai Kutató Központ):

A P2Y₁₂ receptor elméleti modellje és dinamikája

10 perc szünet

Molekuladinamikai szekció

2013. április 30. 11:20-12:20 *Üléselnök: Komáromi István*

Vass Márton, Bogár Ferenc, Jójárt Balázs, Keserű György, Paragi Gábor, Tarcsay Ákos (Richter Gedeon Nyrt., SZTE ÁOK Orvosi Vegytani Intézet, SZTE JGYPK Kémiai Informatika Tanszék):

Molekuladinamikai szimulációval előállított fehérje konformációk alkalmazása G-fehérje kapcsolt receptorokon végzett virtuális szűrésekben

Hegedűs Tamás (MTA-SE Molekuláris Biofizikai Kutatócsoport, SE Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet):

A sejt kemoimmunitási rendszer fehérjeinek gyógyszerkölcsonhatásai

Janzsó Gábor, Leitgeb Balázs, Fülöp Livia, Penke Botond, Bogár Ferenc (MTA SZBK Biofizikai Intézet, SZTE ÁOK Orvosi Vegytani Intézet, MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport):

Az A₁₋₄₂ és az A₁₋₄₂ izopeptid aggregációjáról

Zárszó

2013. április 30. 12:20-12:30

Üdvözléssel,

Dr. Lopata Antal

a QSAR és Modellezési Szakcsoport elnöke