



Magyar NMR Munkabizottság

MTA Kémiai Tudományok Osztálya NMR Munkabizottsága

MKE Analitikai Szakosztály NMR Szakcsoportja

A 2018. évi Munkabizottsági ülés tudományos programja

Helyszín: a Richter Gedeon Nyrt. üdülője
(8636 Balatonszemes, Munkácsy Mihály utca 1.)

Május 24. (csütörtök)

11:00 **Érkezés, regisztráció, szendvicsek**

12:55 **Megnyitó / Opening**

Batta Gyula

First session: Proteins in Motion – NMR and More

Chair: András Perczel

13:00 **NMR and Post-Structural Biology**

Robert Konrat

Department of Structural and Computational Biology, Max F. Perutz Laboratories,
University of Vienna, Austria

13:50 **An example for the role of NMR in cancer research: dynamics and drug development
of KRas as well as its oncogenic mutants**

**Gyula Pálffy, István Vida, András Perczel*

ELTE TTK Kémiai Intézet

14:15 **The pH-dependence of ligand binding in human ileal bile acid-binding protein.**

Exploring the role of histidine protonation

*Horváth Gergő¹, Egyed Orsolya¹, Fizil Ádám^{2,3}, Kovács Mihály¹, *Tőke Orsolya¹*

¹MTA Természettudományi Kutatóközpont; ²Debreceni Egyetem, ³Richter Gedeon Nyrt.

14:40 **New tools for the study of fluorinated compounds**

Adolfo Botana

JEOL UK LTD.

15:20 **COFFEE BREAK**

Second session: NMR Solutions for Solution NMR

Chair: *Katalin E. Kövér*

16:00 **Selective Excitation**

Wolfgang Bermel

Bruker BioSpin GmbH

- 16:35 **Selective Inversion Recovery Experiments with Thioureas: The Case of Weak Association**
**Gábor Tárkányi, Péter Király¹, Réka Mizsei, Gergő Horváth*
¹University of Manchester, Manchester NMR Methodology Group
- 17:00 **New ¹³C selective HSQC sequence for proteins - how far is the limit of pure shift approach?**
*Jens Haller¹, Burkhard Luy¹, *Andrea Bodor²*
¹KIT, Institut für Biologische Grenzflächen 4, Magnetische Resonanz Karlsruhe, Németország; ² ELTE, Kémiai Intézet, Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium
- 17:15 **Biomolecular interactions and stability characterized by microcalorimetry**
Peter Gimeson
Malvern Panalytical
- 18:00 Vacsora / Dinner
- 19:00 **Szociális program**
Szakmai kvízzjáték (a JEOL Europe SAS szponzorálásával)
Szituációs játék
Get together party (a Bruker Biospin és a PCT Kft./ Malvern szponzorálásával)
-

Május 25. (péntek)

Magyar nyelvű előadások I.

Chair: *Rohonczy János*

- 08:30 **Megnövelt információtartalmú HSQC-CLIP-COSY kísérletek**
**Gyöngyösi Tamás¹, Nagy Tamás Milán¹, Boros Sándor², Burkhard Luy³, E. Kövér Katalin¹*
¹Debreceni Egyetem; ²Vichem Chemie Kutató Kft.; ³Karlsruhe Institute of Technology
- 08:55 **Rendezetlen peptidmodellek dinamikájának vizsgálata NMR-rel és számítási módszerekkel**
**Nagy Tamás Milán, Fehér Krisztina, Gönczi Mónika, Fuxreiter Mónika, Kövér Katalin*
Debreceni Egyetem
- 09:10 **Egy "egyszerű" monoszacharid konformációjának és konfigurációjának elemzése**
**Illyés Tünde Zita, Homolya Ágnes, Juhász László, Somsák László, Batta Gyula*
Debreceni Egyetem
- 09:25 **Posztsteron-2,3-acetonid C-20-oxim származékainak sztereokémiája, ¹H és ¹³C NMR jelhozzárendelése**
**Bogdán Dóra^{1,2}, Vágvölgyi Máté³, Hunyadi Attila³, Gáti Tamás⁴, Tóth Gábor⁵*
¹Semmelweis Egyetem, Szerves Vegytani Intézet; ²MTA-TTK, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Mesterséges Transzporterek "Lendület" Kutatócsoport; ³Szegedi Tudományegyetem, Farmakognóziás Intézet; ⁴Servier Kutatóintézet Zrt.; ⁵Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
- 9:40 **Újabb érdekességek a fémorganikus kémia területéről (avagy a hardcore NMR-es és a HETCOR)**
Dubrovay Zsófia, Czirok János Balázs és Vakulya Benedek*
Ximo Hungary Kft.

- 9:55 **Inherensen királis ródiump komplexek relatív konfigurációjának meghatározása**
*Szabó Márk**, *Szilvágyi Gábor*, *Vass Elemér*
 ELTE, Szerves Kémiai Tanszék
- 10:10 **SIRE**
Lomoschitz Andrea^{1,2}*; *Szakács Zoltán²*, *Szántay Csaba²*
¹ELTE TTK Kémiai Intézet; ²Richter Gedeon Nyrt.
- 10:35 KÁVÉSZÜNET
- Magyar nyelvű előadások II.
 Chair: *Berente Zoltán*
- 11:00 **Szöveti elváltozások vizsgálata MR-képpalkotó eljárásokkal, betegségek
 állapotmodelljeiben**
*Kriszta Gábor**, *Berente Zoltán*
 PTE Szentágotthai János Kutatóközpont
- 11:25 **A mangán kontrasztos mágneses rezonancia vizsgálat (MEMRI), mint funkcionális
 képpalkotási lehetőség rágcselelőben**
*Gálosi Rita*¹*, *Szalay Csaba²*, *Aradi Mihály³*, *Perlaki Gábor⁴*, *Kriszta Gábor⁵*, *Berente
 Zoltán^{6,7,8}*, *Lénárd László^{1,9}*, *Karádi Zoltán^{1,9}*
¹PTE ÁOK, Élettani Intézet, Pécs; ²Szent János Kórház, Radiológiai Diagnosztikai Osztály,
 (Budapest); ³Zala Megyei Szent Rafael Kórház, Radiológia és Izotópd diagnosztika Osztály,
 (Zalaegerszeg); ⁴MTA-PTE Klinikai Idegtudományi MR Kutatócsoport (Pécs); ⁵PTE ÁOK,
 Farmakológiai és Farmakoterápiai Intézet, Pécs; ⁶PTE ÁOK, Kísérleti Diagnosztikai
 Képpalkotások Kutatócsoportja (Pécs); ⁷PTE, Szentágotthai János Kutatóközpont, (Pécs) ⁸PTE
 ÁOK, Biokémiai és Orvosi Kémiai Intézet (Pécs) ⁹Molekuláris Neuroendokrinológiai
 Kutatócsoport, PTE Szentágotthai János Kutatóközpont, Pécs)
- 11:50 **Egy Candida ellenes új fehérje (NFAP2) NMR vizsgálata**
*Simon Dorina*¹*, *Czajlik András¹*, *Hajdu Dorottya¹*, *Galgóczy László³*, *Tóth Liliána²*, *Fizil
 Ádám^{1,4}*, *Batta Gyula¹*
¹Debreceni Egyetem; ²Szegedi Tudományegyetem; ³Szegedi Biológiai Kutatóközpont;
⁴Richter Gedeon Nyrt.
- 12:05 **Szerkezet és stabilitás az NMR spektrális jellemzők tükrében**
*Láng András*¹*, *Ónodi Berill²*, *Farkas Viktor²*
¹ELTE, Kémiai Intézet, Szerkezeti Kémiai és Biológiai Laboratórium; ²MTA-ELTE
 Fehérjemodellező Kutatócsoport
- 12:20 **A hurokcseré hatásának vizsgálata kanonikus szerin proteáz inhibitorok esetében**
*Sebák Fanni**, *Boros Eszter*, *Pál Gábor*, *Bodor Andrea*
 Eötvös Loránd Tudományegyetem
- 12:35 **NMR-SAXS módszerek membránmimetikum-peptid kölcsönhatások leírásában**
*Földesné Dudás Erika*¹*, *Wacha András²*, *Bóta Attila²*, *Bodor Andrea¹*
¹ELTE TTK Kémiai Intézet; ²MTA-TTK
- 12:50 **Zárszó**
 A Munkabizottság identitáskérdései
Batta Gyula
- 13:05 **Ebéd/Lunch, hazautazás**