



## Magyar NMR Munkabizottság

MTA Kémiai Tudományok Osztálya NMR Munkabizottsága

MKE Analitikai Szakosztály NMR Szakcsoportja

---

### A 2022. évi Munkabizottsági ülés

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

#### Október 12. (szerda, Wednesday)

11:00            **Érkezés, regisztráció, szendvicsek (arrival, registration, snacks and drinks)**

13:00            **Megnyitó / Opening**  
*Gyula Batta*

#### Első szekció / First session

Chair: Gyula Batta

13:10            **Concatenated NMR Experiments for Rapid Resonance Assignment of Small-to-Medium Size Molecules**

*István Timári<sup>1</sup>, László B. Farkas<sup>1</sup>, Tamás M. Nagy<sup>1</sup>, Tamás Gyöngyösi<sup>1</sup>,  
Ole W. Sørensen<sup>2</sup>, and Katalin E. Kövér<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>University of Debrecen, Hungary; <sup>2</sup>Copenhagen, Denmark

13:40            **Identifying druggable sites of the Mg<sup>2+</sup>-free intermediate state of the catalytic cycle of K-RAS G12C oncogenic protein by NMR spectroscopy**

*Márton Gadanez, Gyula Pálffy, Zsolt Fazekas, Dóra K. Menyhárd, András Perczel*

Laboratory of Structural Chemistry and Biology & MTA-ELTE Protein Modeling Research Group at the Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University

14:00            **DrugRas: the design, synthesis, screening and characterization of compounds targeting oncogenic key K-RAS mutants.**

*Márton Gadanez<sup>1</sup>, Péter Ábrányi-Balogh<sup>2</sup>, Zoltán Orgován<sup>2</sup>, László Petri<sup>2</sup>, Miklós, Keserű György<sup>2</sup> and András Perczel<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Laboratory of Structural Chemistry and Biology & MTA-ELTE Protein Modeling Research Group at the Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University

<sup>2</sup>Medicinal Chemistry Research Group, Research Centre for Natural Sciences

14:20            **Making the best of limited time in multidimensional NMR**

*Péter Király*

JEOL

14:45

...

*Barbara Czarniecki*

Bruker

15:10            **COFFEE BREAK**

16:00 **Csoport fotó**

**Második szekció / Second session**

Chair: Rohonczy János

16:10 **Solid-State NMR in Chemical Science: a short introduction**  
*Gábor Tárkányi*

16:35 **Szilárdfázisú mozgások hatása a CPMAS spektrumokra**  
*Szalontai Gábor*  
Pannon Egyetem

17:00 **Nagynyomású NMR**  
*Domján Attila, Balterer Bence*  
Természettudományi Kutatóközpont

17:15 **Micellás hatóanyaghordozó vizsgálata szilárd- és oldatfázisban**  
*Galgóczi Bálint, Fecske Dóra, Kasza György, Iván Béla, Domján Attila*  
ELKH TTK

17:30 **Az NMR spektroszkópia alkalmazása egy új funkcionális élelmiszer adalék család, az anyatej-cukrok kutatása és fejlesztése során**  
*Podányi Benjamin*  
DSM Nutritional Products Hungary Kft.

18:00 **VACSORA / DINNER**

19:00 **Szociális program**

---

**Október 13. (csütörtök, Thursday)**

**Harmadik szekció / Third session (in Hungarian)**

Chair: E. Kövér Katalin

07:00 **REGGELI / BREAKFAST**

08:30 **NMR Covid idején**  
*Batta Gyula<sup>1</sup>, Gai Jiawei<sup>1</sup>, Bereczki Ilona<sup>1</sup>, Hirsch Edit<sup>2</sup>, Bay Péter<sup>1</sup>*  
<sup>1</sup>Debreceni Egyetem, <sup>2</sup>Budapesti Műszaki Egyetem

08:50 **A Bruker IconNMR mérésautomatizáló szoftver továbbfejlesztése a Nyitott NMR labor jobb kihasználására.**  
*Rohonczy János*  
ELTE, Szervetlen Kémiai Tanszék

09:05 **A nonuniform sampling gyógyszeripari alkalmazásának jelentősége – válogatott példák a kismolekulás szerkezetkutatásból**  
*Szigetvári Áron, ifj. Szántay Csaba*  
Richter Gedeon Nyrt., Szerkezetkutatási Osztály

09:25 **Mágneses magrezonancia (NMR) módszerek alkalmazása biomolekuláris kölcsönhatások jellemzésére**  
*Farkas László Bence*  
Debreceni Egyetem

- 09:40      **Organokatalitikus reakció vizsgálata az átmeneti komplexen keresztül**  
Balterer Bence, Varga Szilárd, Soós Tibor, Domján Attila  
 ELKH TTK
- 09:55      **A "mentális ugrások" szerepe a kismolekulás szerkezetkutatásban**  
Weber Márton<sup>1</sup>, Szigetvári Áron<sup>2</sup>, *iff.* Szántay Csaba<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem - Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,  
<sup>2</sup>Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutatási Osztály
- 10:15      **COFFEE BREAK**
- Negyedik szekció / Fourth session (in Hungarian)**  
 Chair: *Szántay Csaba*
- 10:45      **<sup>1</sup>H-<sup>77</sup>Se HSQMBC NMR módszer továbbfejlesztése és alkalmazása szénhidrát-fehérje kölcsönhatás vizsgálatára**  
Timári István<sup>1</sup>, Raics Mária<sup>2</sup>, Tardi Zsuzsanna<sup>1</sup>, Illyés Tünde Zita<sup>1</sup>, Szilágyi László<sup>1</sup>, E. Kövér Katalin<sup>2,3</sup>  
<sup>1</sup>Debreceni Egyetem TTK Szerves Kémiai Tanszék  
<sup>2</sup>Debreceni Egyetem TTK Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék  
<sup>3</sup>ELKH-DE Molekuláris Felismerés és Kölcsönhatás Kutatócsoport
- 11:05      **A posztzinaptikus GKAP fehérje és a dinein könnyűlánc (DYNLL2) multivalens interakciójának vizsgálata**  
Nagy-Kanta Eszter<sup>1</sup>, Helena Tossavainen<sup>2</sup>, Gáspári Zoltán<sup>1</sup>, Perttu Permi<sup>2</sup>, Péterfia Bálint<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Információs Technológiai és Bionikai Kar;  
<sup>2</sup>University of Jyväskylä, Finnország
- 11:20      **Funkcionalitásukban sérült mutáns humán epesav-kötő fehérjék dinamikai vizsgálata**  
Horváth Gergő, Balterer Bence, Micsónai András, Kardos József, Tőke Orsolya  
 Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ, NMR Kutatólaboratórium  
 ELTE Természettudományi Kar, Biológiai Intézet
- 11:45      **A Shank1 PDZ domén szerkezeti és funkcionális vizsgálata**  
Sánta Anna<sup>1</sup>, Varjassy Anna<sup>1</sup>, Li Jessica Amy<sup>1</sup>, Gáspári Zoltán<sup>1</sup>, Batta Gyula<sup>2</sup>, Péterfia Bálint<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Információs Technológiai és Bionikai Kar  
<sup>2</sup>Debreceni Egyetem
- 12:00      **Rendezetlen és fibrilláris fehérjeszakaszok konformersokaságainak generálása és szelekciója**  
Harmat Zita, Dudola Dániel, Gáspári Zoltán  
 Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Információs Technológiai és Bionikai Kar
- 12:20      **Zárszó (Closing remarks)**  
Batta Gyula (elnök)
- 12:30      **Ebéd / Lunch**