

Magyar NMR Munkabizottság

MTA Kémiai Tudományok Osztálya NMR Munkabizottsága

MKE Analitikai Szakosztály NMR Szakcsoportja

A 2023. évi Munkabizottsági ülés programja

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

Szeptember 8. (péntek, Friday)

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

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

Első szekció / First session – Megemlékezés E. Kövér Katalin akadémikus professzor asszony szakmai életútjáról / Commemoration of Prof. Katalin Kövér's professional career

Chair: Gyula Batta

13:10 **Remembering Kati - Improving the Sensitivity of NMR Experiments**
Dusán Uhrin
University of Edinburgh, UK

13:35 **Methodology Developments to Overcome Resolution Challenges**
Péter Király
JEOL (U.K.) LTD

14:00 **Highlights from joint projects with Katalin**
Ole W. Sorensen

14:25 **From BIRDs to Perfect Echoes – encounters with Kati, a kindred spirit and wonderful person**
Burkhard Luy
Karlsruhe Institute of Technology

14:50 **COFFEE BREAK**

15:25 **Csoport fotó / Group photo**

Második szekció / Second session

Chair: Andrea Bodor

15:30 **Automation tools**
Daniel Mathieu
Bruker BioSpin GmbH

15:55 **The new Generation of JEOL NMR: ECZ Luminous Series**
Ahmed Dhifaoui
JEOL (EUROPE)SAS

16:20 **Investigation of the interaction between the ATF2 transactivation domain and mitogen-activated protein kinases**
Orsolya Tőke, Klára Kirsch, András Zeke, Anita, Alexa, Attila Reményi
Természettudományi Kutatóközpont

16:40 **Challenges and new opportunities at XiMo. Quality, qNMR and impurities**
Szabolcs Balogh
XiMo Hungary

17:00 **Structure determination of the Mg²⁺-bound and -free KRAS-G12C/GDP complex using NMR-driven molecular dynamics simulations**
Márton Gadanez, András Perczel
Eötvös Loránd University (ELTE)

17:25 Rövid szünet / Short break

A második szekció folytatása Magyar nyelven / Continuation of second session in Hungarian

17:35 **Egy biológiailag aktív peptid toxin szerkezetvizsgálata modern NMR és számítástechnikai módszerekkel** (fiatal kutatók előadói díja pályázat)
Tardi Zsuzsanna¹, Nagy Tamás Milán², Naseem Muhammad Umair³, E. Kövér Katalin⁴, Panyi György³, Timári István¹
¹Debreceni Egyetem TTK Szerves Kémiai Tanszék, ²Umeå University Faculty of Science and Technology, ³Debreceni Egyetem ÁOK Biofizikai és Sejtbiológiai Intézet, ⁴Debreceni Egyetem TTK Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

17:50 – 18:15 **Mesterséges intelligencia?**
Végh János
Debreceni Egyetem

18:30 **VACSORA / DINNER**

19:30 **Szociális program, borozás / Social program, wines & snacks**

Szeptember 9. (szombat, Saturday)

Harmadik szekció / Third session (in Hungarian)

Chair: Szakács Zoltán

07:00 **REGGELI / BREAKFAST**

08:30 **Flexibilitás és funkció az intracelluláris lipid-kötő fehérjékben**

Teski Tamara¹, Horváth Gergő¹, Micsonai András², Kardos József², Tőke Orsolya¹

¹Természettudományi Kutatóközpont; ²Micsonai András, Kardos József: ELTE Biokémi tanszék

08:50 **NMR spectroscopy against food fraud**

Domján Attila

AGES

09:10 **Egy átmenetifém trifoszfánkomplexének szerkezetigazolása DNMR spektrumszimulációval**

¹Rohonczy János, ²Kovács Ilona

¹ELTE, Szervetlen Kémiai Tanszék, ²BMGE, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

09:25 **Kukurbituril komplexek szerkezetanalízise**

Turczel Gábor, Miskolczi Zsombor, Biczók László, Tőke Orsolya

Természettudományi Kutatóközpont

09:40 **Szilárdfázisú molekuláris mozgások alakfüggése, CP dinamika, II: HMTA vs. TEDA**

Szalontai Gábor

Pannon Egyetem

10:00 **Újabb eredmények a kvantitatív NMR területén az NSZKK-ban**

Boros Sándor

NSZKK

10:20 **Prolin cisz-transz izoméria rendezetlen fehérjékben és peptidekben**

Sebák Fanni¹, Ecsédi Péter², Papp Nándor¹, Szolomájer János³, Nyitray László², Tóth Gábor³, Bodor Andrea¹

¹ELTE TTK Kémiai Intézet, ²ELTE TTK Biológiai Intézet, ³Szegedi Tudományegyetem Orvosi Vegytani Intézet

10:35 **Néhány izgalmas példa minor komponensek NMR-spektroszkópiai vizsgálatára**

Szigetvári Áron

Richter Gedeon Nyrt.

10:55 **COFFEE BREAK**

Negyedik szekció / Fourth session in Hungarian: (zömében) a fiatal kutatók előadói díjra pályázók előadásai

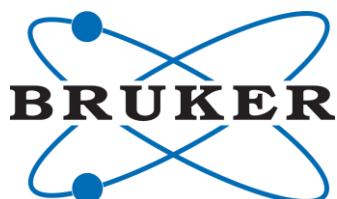
Chair: Rohonczy János

- 11:15 **Nagynyomású NMR mérések**
Balterer Bence, Domján Attila, Tőke Orsolya, Turczel Gábor
ELKH TTK
- 11:30 **Másodlagos kémiai eltolódások interpretációja: kihívások és megoldások rendezetlen fehérjék szerkezeti hajlamainak jellemzése során**
Kovács Dániel¹, Bodor Andrea²
²Eötvös Loránd Tudományegyetem, Analitikai Kémiai Tanszék, Analitikai és BioNMR laboratórium,
¹Eötvös Loránd Tudományegyetem, Hevesy György Kémia Doktori Iskola
- 11:45 **Új gymnopeptidok szerkezetmeghatározása**
Weber Márton¹, Szigetvári Áron², Béni Zoltán²
¹BME, ²Richter Gedeon Nyrt.
- 12:00 **Célzott kötődésvizsgálat élő-sejtes mintákon telítés-átviteli hármás differencia (STTD) NMR stratégiával**
¹Farkas László Bence, ^{1,2}Nagy Tamás Milán, ¹Racsó Márk, ¹Sakar Arjit, ¹Tóth István Balázs, ³Borics Attila, ¹E. Kövér Katalin, ¹Timári István
Debreceni Egyetem (Debrecen), Umeåi Egyetem (Svédország), Szegedi Biológiai Kutatóközpont (Szeged)
- 12:15 **Glikopeptid antibiotikumok önszerveződése sejtfal analóg peptid ligandumokkal.**
Erdei Réka Pálma, Izsépi László, Dr. Batta Gyula
Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszék
- 12:30 **Fehérjék diffúziója denaturáló közegben és makromolekularis zsúfoltság jelenlétében**
(doktori elővétel)
Szabó Csenge Lilla
Eötvös Loránd Tudományegyetem
- 12:55 **Eredményhirdetés, zárszó**
(Batta Gyula, elnök)
- 13:05 **Ebéd / Lunch**

A konferencia támogatói / Sponsors:



**DEBRECENI
EGYETEM**



FLEXTRA^{LAB}

A konferencia szociális programján felszolgált borok a Dancsó Pince termékei.

Dancsó Pince

 Borkostolók és bor értékesítés

* Etyek-Budai borvidék, Velence-tavi körzet

 2475, Kápolnásnyék Bartók utca 12.

 dancsopince@gmail.com  06203175821



Dancsó