



Válogatás

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya által kiválasztott, aktuális kiemelt a publikációk az omikron kötődési módjának analizésével és az aromás rendszerek közötti konjugációval foglalkoznak.

Perczel András osztályelnök, az MTA rendes tagja

Az omikron kötődési mód: az ACE2 és omikron receptorkötő domén komplexének kontaktus- és dinamikai analizése

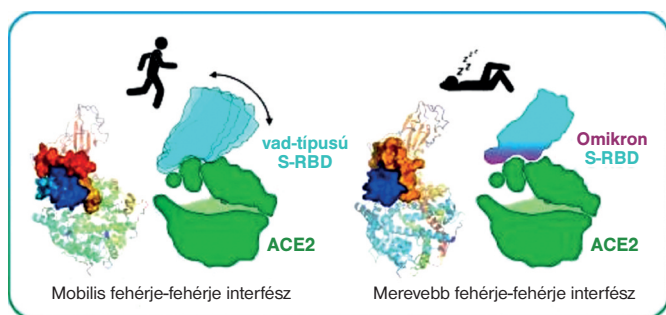
Journal of Chemical Information and Modelling, 2022, 62

Zsolt Fazekas¹, Dóra K. Menyhárd^{1,2}, András Perczel^{1,2}

¹Laboratory of Structural Chemistry and Biology, Institute of Chemistry, ELTE Eötvös Loránd University

²MTA-ELTE Protein Modeling Research Group, Eötvös Loránd Research Network (ELKH), ELTE Eötvös Loránd University

A publikációban az ACE2 fehérje és a SARS-CoV-2 egyik kulcsfehérjéjének komplexét vizsgálták számítógépes szimulációkkal. A vad típusú komplexhez képest jelentős eltéréseket találtak mind a két fehérje érintkezési felületén, mind a mozgásukban. Ez a tanulmány elősegítheti a vírus működésének pontosabb megértését, illetve antivirális szerek, például vírusellenes antitestek fejlesztését



Konjugáció 3D és 2D aromás rendszerek közt: valóban létezik? A karborán-kapcsolt heterociklusok esete

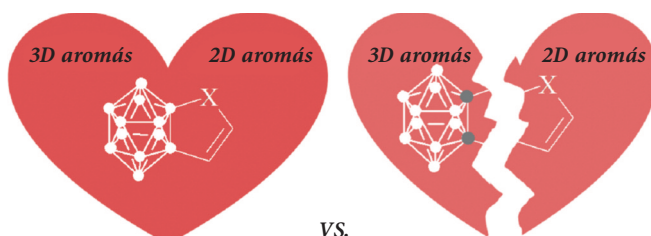
Chemical Science, 2022

Dániel Buzsáki^{1,2}, Máté Barnabás Kovács², Evelyn Hümpfner², Zsófia Harcsa-Pintér², Zsolt Kelemen²

¹MTA-BME Computation Driven Chemistry Group, Műegyetem rkp 3., Budapest

²Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics, Műegyetem rkp 3., Budapest

Az aromasság, amelyet az elektronok nagymértékű, kiterjedt delokalizációja okoz, meghatározó jelenség a kémiában. Számos



Létezik konjugáció köztük?

közlemény jelent meg az ún. 2 és 3 dimenziós aromás rendszerek kölcsönhatásairól. Munkánk során megmutattuk, hogy valójában nem lép fel konjugáció a két rendszer közt, ami ugyanakkor lehetőséget teremt akár új katalizátorok (például hidrogéntárolás) tervezéséhez is.

TUDOMÁNY

Jubileumi vegyészmérnöki konferencia Veszprémben: 50. Műszaki Kémiai Napok

A Pannon Egyetem Mérnöki Kara 2022. április végén rendezte meg jubileumi tudományos konferenciáját a Pannon Egyetemen, Veszprémben. Az idén új helyszínen, a felújított E épületben talált otthonra a rendezvény, ahol közel 100 résztvevő több mint 80 prezentációban (előadások, poszterek) mutatta be tudományos eredményeit.

A konferencia nyitórendezvényét Németh Sándor, a Mérnöki Kar dékánja vezette le, s Gelencsér András akadémikus, a Pannon Egyetem rektora, majd Kovács Áron Zoltán önkormányzati képviselő köszöntötte a résztvevőket. A megnyitó végén a dékán virágcsokorral köszöntötte meg a szervezők (Bélafiné Bakó Katalin és Klein Mónika) munkáját.

Németh Sándor egyetemi docens a pulpitusnál

(forrás: Nagy Lajos/Napló)

