



Válogatás

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya által kiválasztott két publikáció közül az elsőben a szerzők innovatív, nem empirikus DFT- (Density Functional Theory) megoldást dolgoztak ki a töltött rendszerek számítására. A második közlemény szerzői hagyományos amidvegyületek kénatomot tartalmazó változatait állították elő, amelyek igazoltan képesek szelektíven és stabilan kapcsolódni meghatározott fehérjékhez.

Perczel András

az MTA Kémiai Tudományok Osztályának elnöke

Nagy pontosságú sűrűségfunkcionál-elmélet töltött rendszerek közti nemkovalens kölcsönhatások vizsgálatára

Science Advances, 2026

<https://www.science.org/doi/full/10.1126/sciadv.adz8521>

Heng Zhao¹, Balázs D. Lőrincz^{2,3,4}, Tobias Henkes⁵, Dénes Berta^{2,3,4}, Péter R. Nagy^{2,3,4}, Alexandre Tkatchenko⁵, Stefan Vuckovic¹

¹Department of Chemistry, University of Fribourg, Fribourg, Switzerland.

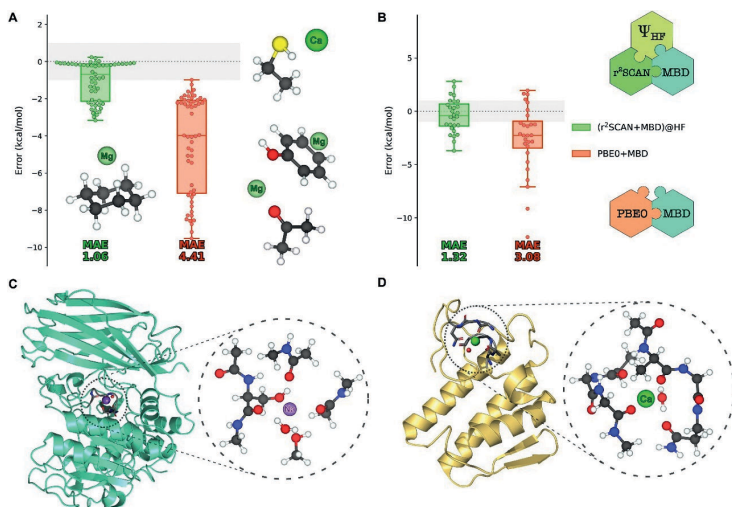
²Department of Physical Chemistry and Materials Science, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Budapest, Hungary.

³HUN-REN-BME Quantum Chemistry Research Group, Budapest, Hungary.

⁴MTA-BME Lendület Quantum Chemistry Research Group, Budapest, Hungary.

⁵Department of Physics and Materials Science, University of Luxembourg, Luxembourg City, Luxembourg

A töltött rendszerek számítása komoly kihívást jelent a csatolt elektrosztatika-, polarizáció- és diszperziómodell hibái miatt. A szerzők megoldása innovatív, nem empirikus DFT-modell. Emellett egyedien pontos referenciákból kidolgozták az első, realisztikus ion–fehérje kötődés adatbázist, és ezen validálták az új DFT pontosságát. Az új megközelítés kiváló töltött rendszerekre, amelyek például a gyógyszerkutatás, az elektrolitok, az elektro-, redox- vagy koordinációs kémiai modellezéskor szükségesek.



α -Halotioamid kötőelemek fokozott ciszteinreaktivitással és -szelektivitással kovalens fehérjelölés céljából

Nature Communications, 2026

<https://www.nature.com/articles/s41467-026-72993-6>

László Petri^{1,2,3}, Ronen Gabizon⁴, Nikolett Péczka^{1,2}, Péter Ábrányi-Balogh^{1,2,5}, József Simon^{1,6}, Tímea Imre^{1,6}, György G. Ferenczy^{1,2}, Nir London⁴, György M. Keserű^{1,2,5}

¹Medicinal Chemistry Research Group, Research Centre for Natural Sciences, Budapest, Hungary

²National Laboratory of Pharmaceutical Research and Development, Research Centre for Natural Sciences, Budapest, Hungary

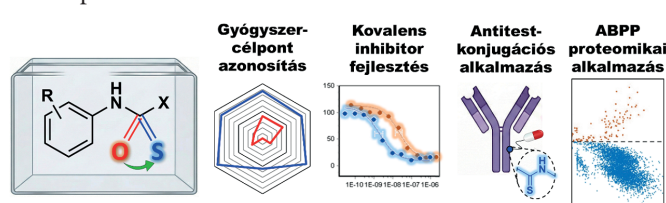
³Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest, Hungary

⁴Department of Chemical and Structural Biology, The Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel,

⁵Department of Organic Chemistry and Technology, Budapest University of Technology and Economics, Hungary

⁶MS Metabolomics Research Laboratory, Research Centre for Natural Sciences, Budapest, Hungary

A jövőben új kémiai stratégia segítheti a célzott gyógyszerfejlesztési kutatásokat. A tanulmány során a HUN-REN TTK munkatársai hagyományos amidvegyületek kénatomot tartalmazó változatait állították elő és számos alkalmazásban igazolták, hogy ezek képesek szelektíven és stabilan kapcsolódni meghatározott fehérjékhez. Az így létrehozott molekulák ígéretesek lehetnek daganatellenes gyógyszerek és modern biológikumok, például antitest–gyógyszer konjugátumok fejlesztésében, de akár új gyógyszer-célpontok felfedezésében is.



Az asbesztkrizisről az Akadémián

Az MTA podcastjában Weiszbürg Tamással, az ELTE ásványtani tanszékének korábbi vezetőjével és Pósfai Mihállyal, az MTA elnökével, a környezeti ásványtan professzorával hallhatnak beszélgetést:

<https://mta.hu/podcast/a-nyugat-magyarorszag-i-asbesztkrizisrol-posfai-mihallyal-es-weiszburg-tamassal-115449>

Lapzárta után:

Ankét az asbesztválságról: https://mta.hu/mta_hirei/temanap-az-akademian-asbesztvalsag-tenyek-kockazatok-megoldasok-115482