

MEGHÍVÓ

Az MTA Szervetlen és Fémorganikus Kémiai Munkabizottság és az MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság szervezésében tartandó előadóülésre.

Helyszín:

Demjén, Egri Korona Borház, 3300 Eger Demjén Hrsz:0183/5

Időpont:

2011. március 24 – 26. (csütörtök - szombat)

NAPIREND:

2011. március 24. (csütörtök)

Szekció elnök: Pasinszki Tibor

- 14:00-14:10 **Köszöntő** (Pasinszki Tibor és Kubinyi Miklós)
- 14:10-14:30 **Kubinyi Miklós:** Varsányi György professzor munkássága
- 14:30-14:50 **Varga Olívia**, Baranyai Péter, Kállay Mihály, Kubinyi Miklós, Vidoczy Tamás: Fotokromizmus fémionok jelenlétében: spiropirán (6-nitro-BIPS) és fémkomplexeinek fotofizikai és fotokémiai tulajdonságai.
- 14:50-15:10 **Vörös Tamás**, Bazsó Gábor, Tarczay György: Mátrixizolációs Raman mérési lehetőség kidolgozása az ELTE-n
- 15:10-15:30 **Góbi Sándor**, Vass Elemér, Magyarfalvi Gábor, Tarczay György: Klasszikus és nemklasszikus hidrogénkötésű komplexek kialakulásának hatása a 2-klór-propionsav VCD spektrumára
- 15:30-15:50 **Krebsz Melinda**, Tarczay György, Pasinszki Tibor: Nitril-szelenidek előállítása és spektroszkópiai vizsgálata mátrixizolációs technikával
- 15:50-16:10 **Gyömöre Ádám**, Csámpai Antal, Czugler Mátyás: Királis és akirális kondenzált piridazinonok és új ferrocéntartalmú Reinecke-sók előállítása, reakciói és a termékek molekuladinamikai és röntgenkrisztallográfiai vizsgálatai
- 16:10-16:50 szünet
- 16:50-17:10 **Tunyogi Tünde**, Jobbágy Csaba, Deák Andrea, Pálincás Gábor: Arany(I) makrociklusok előállítása és szerkezeti jellemzése
- 17:10-17:30 **Holczbauer Tamás:** Organokatalizátor "öngyilkos" reakciója

- 17:30-17:50 **Palló Anna:**
Fehérje kristályszerkezet-vizsgálat az SzKI-ben
- 17:50-18:10 **Varga Zoltán**, Hargittai Magdolna:
A hőmérséklet hatása a molekul szerkezetre
- 18:10-18:30 **Mörtl Mária:** Szilil-karbamát kémia újabb eredményei
- 18:30- vacsora

2011. március 25. (péntek)

8:00-9:00 reggeli

Szekció elnök: Kovács Attila

- 9:00-9:20 **Vidóczy Tamás**, Becsei Tamás, Gottfried Grabner, Gottfried Köhler, Hessz Dóra, Pál Krisztina, Kubinyi Miklós: Fluoreszcencia-élettartam becslése az abszorpciós spektrum alapján merev vázas 7-amino-kumarinok esetében
- 9:20-9:40 **Pongor Gábor**, Eőri János, Kolos Zsuzsanna, :
Direkt Invertálás a Spektrális Altérben (DISS): A nem-normált verzió: elmélet és alkalmazások
- 9:40-10:00 **Szabó István**, Császár Attila: Hőmérsékletfüggő átlagolt molekul szerkezetek.
- 10:00-10:20 **Stirling András**, Pápai Imre:
CO₂ oldódás vízben: egy "klasszikus" új feldolgozásban
- 10:20-10:40 szünet
- 10:40-11:00 **Bakó Imre:** Frusztrált komplexek vizsgálata oldatfázisban: elméleti számítások
- 11:00-11:20 **Fogarasi Géza:** Izomer átalakulások és konformációs változások kvantumkémiai vizsgálata biomolekulákban
- 11:20-11:40 **Szalontai Gábor**, Besenyei Gábor, Párkányi László: Homonukleáris egykvantum – kétkvantum térbeli korrelációk szilárd mintákban. A szélessávú BaBa eljárás alkalmazhatósága dipolárisan gyengén csatolt ³¹P-³¹P spinrendszerekre.
- 11:40-12:00 **Oláh Julianna:** Ösztrogén metabolizmus modellezése: A B gyűrű szerepe
- 12:00-14:00 ebéd szünet

Szekció elnök: Kubinyi Miklós

- 14:00-14:20 **Tarczay György:** ELTE TTK - MTA AKI lézerspektroszkópiai és kinetikai laboratórium - Indulás és tervek.
- 14:20-14:40 **Mayer István**, Pedro Salvador, Bakó Imre és Stirling András:
"Vannak-e atompályák a molekulákban?"
- 14:40-15:00 **Kovács Attila**, Ivan Infante: Aktinida oxidok elméleti vizsgálata

- 15:00-15:20 **Pillió Zoltán**, Tajti Attila, Szalay Péter: Effektív ritka mátrix algoritmus, a "ladder" járulék hatékony számolása a CCSD módszeren belül
- 15:20-15:40 **Nagy Péter**, Szabados Ágnes, Surján Péter:
A Mayer-ortogonalizáció tulajdonságai
- 15:40-16:00 **Könczöl László**, Benkő Zoltán, Makkos Eszter, Sólyom Zsófia, Szieberth Dénes, Nyulászi László: Lewis sav-bázis párokkal történő reverzibilis komplexképzés
- 16:00-16:40 szünet
- 16:40-17:00 **Bombicz Petra**: Kalixarének izostrukturalitása és polimorfija. De mi van a kettő között?
- 17:00-17:40 **Lázár István**, Bereczki Helga Fruzsina, Gyurkó István, Komlósi Zsuzsanna, Kuttor Andrea, Nagy Gergely, Nánási Márta, Németh Miklós, Daróczy Lajos, Fábíán István: Szilika aerogélek és aerogél kompozitok előállítása, szerkezete és lehetséges alkalmazásai
- 17:40-18:00 **Bereczki Helga Fruzsina**, Kuttor Andrea, Lázár István, Fábíán István: Funkcionalizált szilika aerogélek mint új típusú folyadékkromatográfiai állófázisok
- 18:00-18:20 **Szalay Roland**: Szililezett és sztannilezett gyűrűs savamid-származékok
- 18:30- vacsora

2011. március 26. (szombat)

8:00-9:00 reggeli

Szekció elnök: Tarczay György

- 9:00-9:20 **Benkő Zoltán**, Dietrich Gudat, Nyulászi László, Szieberth Dénes: N-heterociklusos foszfinok kötésviszonyai
- 9:20-9:40 **Sarka János**, Császár Attila: Alagúthatás karbénokban
- 9:40-10:00 **Zoboki Tamás**, Surján Péter: A geminál hullámfüggvények egy stacionárius tulajdonságáról
- 10:00-10:20 szünet
- 10:20-10:40 **Krámos Balázs**, Oláh Julianna: Direkt hidridtranszfer vizsgálata a P450_{nor} enzimben
- 10:40-11:00 **Jeszenszki Péter**, Szabados Ágnes, Surján Péter: Ultrahideg atomok kezelése a Bose-Hubbard modellben
- 11:00-11:20 **Bazsó Gábor**, Tarczay György, Fogarasi Géza, Szalay Péter: Citozon tautomerek gerjesztett állapotainak vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiai és kvantumkémiai módszerekkel
- 11:20-11:30 **Zárszó** (Pasinszki Tibor és Kubinyi Miklós)

