

Beszámoló az Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság (AMMB) 2006. évi tevékenységéről

Az AMMB-hoz tartozó kutatók hagyományos fóruma az Anyagszerkezet-kutatási Konferencia. 2006. május 23-24-én tartottuk a XI. Anyagszerkezet-kutatási konferenciát Mátrafüreden. A programban szerepeltek ún. „szemléletformáló” előadások, amelyeknek megtartására a szerkezeti kémiában kiemelkedő eredményeket elérő tudósokat kértünk fel. Emellett fiatal kutatók is bemutatkozási lehetőséget kaptak.

2006-ban folytatattuk a „Szerkezeti Kémiai Előadások” sorozatot, amelyeknek a Kémiai Kutatóközpont ad helyszínt. A Kémiai Kutatóközpont új NMR-műszerét bemutató előadás utánra laboratórium-látogatást is szerveztünk.

Az előadások listáját és a konferencia programját mellékeljük.

Budapest, 2006. november 22.



titkár



elnök

2006

Január 31.	Deák Andrea MTA KK SZKI	Prológus az arany vegyületek kémiájához
Március 14.	Besenyei Gábor MTA KK SZKI	Szerkezet és reakciókészség. A kémiai problémák egyik lehetséges megközelítési módja.
Április 4.	Kubinyi Miklós MTA KK SZKI	Fotoaktív szupramolekuláris rendszerek
Május 9.	Keszei Ernő ELTE Kémiai Intézet	DNS károsodás és javítás ultragyors dinamikája
Május 30.	Oszlányi Gábor MTA SzFOKI	Charge flipping: Új eljárás a krisztallográfiai fázisprobléma megoldására
Június 13.	Keresztury Gábor MTA KK SZKI	Eredmények, új lehetőségek és megoldandó feladatok a rezgési spektrumok értelmezésében
Július 25.	Ana M Costero University of Valencia	Colorimetry and fluorescent anion sensors: applications of supramolecular chemistry
Október 16.	Tárkányi Gábor MTA KK SZKI	A Kémiai Kutatóközpont 600 MHz-es NMR műszerének bemutatása
November 21.	Korányi Tamás MTA KK SZKI	Alumínium (és bór) atomok elhelyezkedésének vizsgálata zeolitokban szilárdtest NMR spektroszkópiával

**XI. Anyagszerkezet-kutatási Konferencia
Mátrafüred**

Program
2006. május 23. (kedd)

10.00-10.05		<i>Megnyitó</i>	
Üléselnök: Sohár Pál			
A1	10.05-10.25	Keresztury Gábor MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézet	<u>Keresztury Gábor</u> : A rezgési átmeneti momentum irányok meghatározása síkszimmetrikus molekulákban a kísérleti és elméleti módszerek kombinálásával: Újabb eredmények
A2	10.25-10.45	Sztraka Lajos BME Fizikai Kémia Tanszék	<u>Sztraka Lajos, Veli-Matti Horneman</u> : Újabb eredmények a formamid nagyfelbontásos $n=3<-1$ és $n=3<-2$ átmeneteinek hozzárendelésében.
A3	10.45-11.05	Réffy Balázs ELTE-MTA Szerkezeti Kémiai Kutatócsoport	<u>Réffy Balázs, Hargittai Magdolna</u> : Alumínium-halogenid molekulák: Szerkezet és stabilitás
11.05-11.20		<i>Szünet</i>	
Üléselnök: Kálmán Alajos			
B1	11.20-11.40	Bóta Attila BME Fizikai Kémia Tanszék	<u>Bóta Attila</u> : Kísszögű, valamint anomális kísszögű röntgenszórás
B2	11.40-12.00	Lukovits István MTA KK Felületkémiai és Katalízis Intézet	<u>Lukovits István</u> : Kekulé határszerkezetek megszámlálása grafitban és szén-nanocsövekben
B3	12.00-12.20	Varga Olívia BME Fizikai Kémia Tanszék	<u>Varga Olívia, Kubinyi Miklós, Grofcsik András, Baranyai Péter, Bitter István</u> : Spirobenzopirán-származékok fotokrómtulajdonságai
B4	12.20-12.40	Báthori Nikoletta MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézet	<u>Báthori Nikoletta, Bombicz Petra, Bihátsi László, Czugler Mátyás</u> : Nagypórusú hexagonális zárványkristályok
12.40-14.00		<i>Ebéd-szünet</i>	

Üléselnök: Mayer István			
Sz1	14.00-14.45	Fogarasi Géza ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék	<u>Fogarasi Géza</u> : Ab initio kvantumkémiaán alapuló molekuladinamika
Sz2	14.45-15.30	Hargittai Magdolna ELTE-MTA Szerkezeti Kémiai Kutatócsoport	<u>Hargittai Magdolna</u> : Molekulaszerkezet meghatározás: kísérlet és/vagy elmélet?
15.30-15.50		<i>Szünet</i>	
Üléselnök: Szalontai Gábor			
Sz3	15.50-16.35	Sohár Pál MTA-ELTE Spektroszkópiai Szerkezetkutató Csoport	<u>Sohár Pál</u> : Mi lesz veled kutatás - (egyetemi) oktatás?
Sz4	16.35-17.10	Kálmán Alajos MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézet	<u>Kálmán Alajos</u> : "Publicare necesse est."
17.10-		<i>Szünet, vacsora</i>	
19.00-		Hargittai Magdolna ELTE-MTA Szerkezeti Kémiai Kutatócsoport	Kiralitás (esti beszélgetés)

2006. május 24. (szerda)

Üléselnök: Keresztury Gábor			
C1	8.30-8.50	Németh Balázs BME Szervetlen Kémia Tanszék	<u>Németh Balázs</u> : Aminopirimidinek protonálódásának vizsgálata
C2	8.50-9.10	Kovács Attila BME Általános és Analitikai Kémia Tanszék	Nyulasi Bálint, <u>Kovács Attila</u> : X-...(H ₂) _n van der Waals komplexek (X=halogén) kvantumkémiai vizsgálata
C3	9.10-9.30	Korányi Tamás MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézet	<u>Korányi Tamás</u> , B. Nagy János: Alumínium és bór helyzetének jellemzése zeolitokban szilárdtest NMR spektroszkópiával
C4	9.30-9.50	Solt Iván ELTE Molekulaspektroszkópiai Laboratórium	<u>Solt Iván</u> , Fuxreiter Mónika, Császár Attila: A restriktós endonukleázok specifitász-csökkenésének okai Mn(II) hatására a Mg(II) ionhoz viszonyítva
9.50-10.05		<i>Szünet</i>	

Üléselnök: Veszprémi Tamás			
D1	10.05-10.25	Mayer István MTA KK Szerkezeti Kémiai Intézet	<u>Mayer István</u> , Pedro Salvador, Hamza Andrea: Energiapartíciós módszerek
D2	10.25-10.45	Varga Zoltán ELTE-MTA Szerkezeti Kémiai Kutatócsoport	<u>Varga Zoltán</u> , Hargittai Magdolna: Alkáli-halogenidek és lantanida-halogenidek gázfázisú komplexei: Az AlkDyBr ₄ komplexek
D3	10.45-11.05	Czakó Gábor ELTE Molekulaspektroszkópiai Laboratórium	<u>Czakó Gábor</u> , Szalay Viktor, Császár Attila: Szimmetrikus vagy aszimmetrikus reprezentációk
D4	11.05-11.25	Furtenbacher Tibor ELTE Molekulaspektroszkópiai Laboratórium	<u>Furtenbacher Tibor</u> , Czakó Gábor, Császár Attila, Szalay Viktor: Kismolekulák teljes spektroszkópiája
11.25-11.40		<i>Szünet</i>	
Üléselnök: Simon Kálmán			
E1	11.40-12.00	Szalontai Gábor Veszprémi Egyetem Anyag- és Szilikátmérnöki Tanszék	<u>Szalontai Gábor</u> , Kovács Margit: Enantiomerek megkülönböztetési lehetőségei részlegesen rendezett királis fázisú ² H NMR spektroszkópiával. Helikálisan királis trisz(diimin)-ruténium(II) komplexek vizsgálatai.
E2	12.00-12.20	Czinki Eszter ELTE Molekulaspektroszkópiai Laboratórium	<u>Czinki Eszter</u> : Fehérjék másodlagos szerkezetének meghatározása számított NMR paraméterek segítségével
E3	12.20-12.40	Höltzl Tibor BME Szervetlen Kémia Tanszék	<u>Höltzl Tibor</u> : A foszfacetilén dimerizációjának mechanizmusa
12.40-12.45		<i>Zárszó</i>	