

VIII. ANYAGSZERKEZET-KUTATÁSI KONFERENCIA

ELTE TTK Kémiai Tanszékcsoport
Lágymányosi épület, Pázmány Péter sétány 2-4
Budapest, 1998. május 22.

A konferencia programja:

8.15 *Sohár Pál*: Megnyitó

KVANTUMKÉMIA

Üléselnök: Vértés Attila

- 8.20 - 8.45 *Náray-Szabó Gábor* (MTA, ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék): Elektrosztatikus katalízis kristály-gáz határfelületen
- 8.45 - 9.00 *Rohonczy János, Pongor Gábor, Mináry Péter, Kolos Zsuzsanna és Knausz Dezső* (ELTE TTK Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék): Szilárd fázisú C-13 NMR spektrumok kvantumkémiai értelmezése
- 9.00 - 9.15 *Surján Péter, Kállay Mihály és Lázár Armand* (ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék): A polimerizálódó Buckminsterfullerén
- 9.15 - 9.30 *Szabados Ágnes és Surján Péter* (ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék): A szinteltolás módszere a perturbációszámításban
- 9.30 - 9.45 *Füsti Molnár László* (ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék): A fotodisszociáció kvantumdinamikai kezelése
- 9.45 - 10.00 *Nyulaszi László* (BME Szervetlen Kémiai Tanszék): Hogyan tehető a ciklopentadién aromássá?
- 10.00 - 10.15 *Veszprémi Tamás, Hajgató Balázs* (BME Szervetlen Kémiai Tanszék): A diszilén és szilaetén vízaddíciójának mechanizmusa
- 10.15 - 10.30 *Szieberth Dénes és Nyulaszi László* (BME Szervetlen Kémiai Tanszék): Difoszfa-ciklobutadiének stabilitási kérdései
- 10.30 - 10.45 *Szalay Péter* (ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék): A ketenil gyök elektrongerjesztési spektruma: elméleti számítá-

sok és hatásuk a kísérletekre

10.45 - 11.00 *S z ü n e t*

NMR SPEKTROSKÓPIA ÉS GÁZELEKTRON-DIFFRAKCIÓ

Üléselnök: Náray-Szabó Gábor

- 11.00- 11.15 *El-Joubari, A., Bruix, M., Santoro, J., Rico, M., E. Kövér Katalin, Batta Gyula és Szilágyi László* (KLTE Szerves Kémiai Tanszék): A humán pankreász ribonukleáz fehérje szerkezetvizsgálata NMR módszerekkel
- 11.15 - 11.30 *Szalontay Gábor, Csók Zsolt és Benedek Csilla* (VE Szerves Kémiai Tanszék): NMR vizsgálatok részlegesen rendezett fázisban. Optikai tisztaság meghatározása királis folyadékkristályos fázisban ^2H -NMR segítségével
- 11.30 - 11.45 *Halász Judit, Podányi Benjámín, Csutor Andrea, Hajdú Félix (Chinoín)*: Konformáció analízis a Vasopressin V2 receptor antagonistá SR121463 vegyületek körében
- 11.15 - 12.00 *Perczel András, Campbell, I. D. és Day, A. J.* (ELTE TTK Szerves Kémiai Tanszék): A LINK-TSG6 fehérje szerkezetének pH-függése. [HNCA, HN(CO)CA, CBCACONH és más tripla-rezonancia kísérletek a gyakorlatban]
- 12.00 - 12.15 *Csámpai Antal, Wamhoff, Heinrich, Muhr, Jürgen, Horn, Michael, Rohonczy János és Sohár Pál* (ELTE TTK Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék): Uracilok szerkezetvizsgálata
- 12.15 - 12.30 *Abrán Árvácska, Csámpai Antal és Sohár Pál* (ELTE TTK Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék): Ferrocének szerkezetvizsgálata. Formilferrocén-hidrazonok cikloaddíciós reakciótermékeinek szerkezete
- 12.30 - 12.45 *Réffy Balázs, Kolonits Mária, Klapotke, Thomas M., Schulz, Gy. és Hargittai Magdolna* (ELTE Szerkezeti Kémiai Akad. Kut. Csop.): Az arany-trifluorid szerkezete; elektrondiffrakciós és kvantumkémiai vizsgálata
- 12.45- 13.00 *Schultz György* (ELTE Szerkezeti Kémiai Akad. Kut. Csop.):

Az 1,3,5-trisz(trimetil-sztannil)-benzol elektrondiffrakciós vizsgálata

13.00 - 14.00 **E b é d s z ü n e t**

RÖNTGENDIFFRAKCIÓ ÉS MAGKÉMIA

Üléselnök: Simon Kálmán

- 14.00 - 14.15 *Czugler Mátyás, MacNicol, David D. és Weber, Edwin* (MTA KK): Hexa- és oktapodális molekulák
- 14.15 - 14.30 *Fábián László, Argay Gyula és Kálmán Alajos* (MTA KK): Hidrogén atomok átrendeződése által indukált polimorfia
- 14.30 - 14.45 *Böcskei Zsolt, Fülöp Vilmos, Polgár László, Harmat Veronika, Náray-Szabó Gábor és Arányi Péter* (Chinoi): A prolin oligopeptidáz és gátló szerekkel alkotott komplexeinek kristályszerkezete
- 14.45 - 15.00 *Simon Kálmán, Böcskei Zsolt, Hanusz Miklós, Morvai Miklós, Szilágyi Ildikó és Hermecz István* (Chinoi): A kristálypolimorfia jelentősége a gyógyszeriparban
- 15.00 - 15.15 *Bokor Mónika, Marek Tamás, Süvegh Károly, Vértés Attila* (ELTE TTK Magkémiai Tanszék) és *Tompa Kálmán* (MTA KFKI): Pozitronannihiláció és szilárd-fázisú NMR alkalmazása átmenetifém-komplexek szerkezetkutatásában
- 15.15 - 15.30 *Klencsár Zoltán, Kuzmann Ernő, Homonnay Zoltán és Vértés Attila* (ELTE TTK Magkémiai Tanszék), *Vad Kálmán* (MTA Debreceni Atommag Kutató Intézet), *Bánkuti József* (ELTE TTK Technika Tanszék), *Rácz Timea, Bódog Margit, Kotsis Leventéné* (VE Szilikátkémiai és Technológiai Tanszék): A Pr-bevitel hatása az $\text{Eu}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ -d és $\text{EuBa}_2\text{xPr}_x\text{Cu}_3\text{O}_7$ -d magas hőmérsékletű szupravezető kerámiákban

S z ü n e t

OPTIKAI SPEKTROSKÓPIA

Üléseknök: Sohár Pál

- 15.45 - 16.00 *Jalovszky György* (MTA KK): FT-Raman spektrumok intenzitáskorrekciója és a minta hőmérséklet meghatározása Stokes–anti-Stokes intenzitásarányokból
- 16.00 - 16.15 *Keresztury Gábor* (MTA KK): Mérés kontra ab initio számítás a molekularezgések vizsgálatában: frekvencia, intenzitás és polarizáció
- 16.15 - 16.30 *M. Ziegler Ildikó, Grofcsik András, Kubinyi Miklós, Bitter István* (Budapesti Műszaki Egyetem, Fizikai Kémia Tanszék és Szerves Kémiai Technológia Tanszék): Optikai szenzorokban használható kalixarének spektroszkópiái vizsgálata
- 16.30 - 16.45 *Hren Brunó, Mink János és Torma Tamás* (VE Analitikai Tanszék): Kistérfogatú gázrendszerek összetétel-analízise FT-IR spektroszkópiával
- 16.45 - 17.00 *Mihály Judith, Mink János és Kristóf János* (VE Analitikai Tanszék): Elektrokatalizátorok szerkezetének vizsgálata emissziós FT-IR és FT-Raman spektroszkópiái módszerekkel
- 17.00 - 17.15 *Sztraka Lajos és Csonka Gábor* (BME Fizikai Kémiai Tanszék és Szervetlen Kémiai Tanszék): Rezgési-belső rotációs-inverziós átlagolódás figyelembevétele a metilamin flexibilis térszerkezetének meghatározásánál
- 17.15 - 17.30 *Nemes László* (MTA KK): A klór-trifluorid molekula nagyfelbontású FT-IR spektrumának rezgési-forgási analízise
- 17.45 - 18.00 *Kövesdi István* (EGIS Gyógyszergyár): 3D-molekula-szerkezetek, spektroszkópiái és kromatográfiás adatok vizsgálata neurális hálózattal, a fiziko-kémiai paraméterek és a biológiai hatások egymáshoz rendelése, valamint kombinációs kémiai könyvtárak gyors tesztelése céljából
- 18.00 - 18.15 *Pallagi István, Toró András és Jerkovich Gyula* (Gyógyszerkutató Intézet): A Gibbs-reakció mechanizmusa. Indofenol-képződés N-klór-benzokinonimin gyökánionon keresztül. Az S(RN2)-

mechanizmus

- 18.15 - 18.30 *Boros Sándor, Tóth Gábor, Langó József, Barta István és Ambrus Gábor (Gyógyszerkutató Intézet): A borrelidin szerkezetvizsgálata*
- 18.30 - 18.45 *Drahos László, Vékey Károly, Colette, C., De Pauw, E.: (MTA KK): Ionok belső energiaeloszlása az electrospray ionizációs tömegspektrometriában*