

IX. ANYAGSZERKEZET-KUTATÁSI KONFERENCIA

MTA Kémiai Kutatóközpont, Kémiai Intézet
Budapest, Pusztaszeri út 59-67
2002, december 18

- 9.00 *Sohár Pál*: Megnyitó
- 9.10 - 9.25 *Szalay Péter* (ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék): Gerjesztett elektronállapotok nagy pontosságú vizsgálata *ab initio* módszerrel
- 9.30 - 9.45 *Drahos László, Ron M. AS. Heeren és Vékey Károly* (MTA KK): Fourier-transzformációs tömegspektrométeren végzett kísérletek modellezése a MassKinetics program segítségével
- 9.50 - 10.05 *Forgó Péter* (Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék): Modern NMR-spektroszkópiai módszerek alkalmazása természetes eredetű alkaloidok szerkezetvizsgálatában.
- 10.10 - 10.25 *Plánkáné Szabó Terézia* (Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék): Új lehetőségek paramágneses fémkomplexek oldatbeli szerkezet-vizsgálatában az ESR-spektrumcsomag "kétdimenziós" felbontása révén.
- 10.30 - 10.45 *Bacsik Zoltán és Mink János* (MTA KK és VE Analitikai Tanszék): Légköri szennyezők FT-IR spektroszkópiai detektálása
- 10.50 - 11.05 *Kurtán Tibor* (KLTE Szerves Kémiai Tanszék): Kiroptikai spektroszkópia alkalmazása flavanoidok konfigurációjának meghatározására.
- 11.10 - 11.30 Szünet
- 11.30 - 11.45 *Sztáray Bálint, Tomas Baer és Szepes László* (ELTE TTK Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék): Kötési energiák meghatározása fémorganikus molekulákban fotoionizációs módszerekkel
- 11.50 - 12.05 *Gáspár Attila és Harald Berndt* (KLTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék): Lángkemencés technikák fejlesztése atomabszorpciós spektrometriás módszerhez
- 12.10 - 12.25 *Klencsár Zoltán, Németh Zoltán, Kuzmann Ernő, Homonnay Zoltán és Vértes Attila* (MTA-ELTE Nukleáris Szerkezetvizsgáló Kutatócsoport és ELTE TTK Magkémiai Tanszék): Van-e kapcsolat a vas lokális elektromos és mágneses állapota és az anómális lokális elektromos, illetve mágneses ellenállás között a FeCl_2S_4 spinelben?
- 12.30 - 12.45 *Réffy Balázs* (MTA-ELTE Szerkezeti Kémiai Kutató Csoport): A 11. csoport halogenidjeinek elektrondiffrakciós-kvantumkémiai szerkezetvizsgálata
- 12.50 - 13.05 *Bombitz Petra, Czugler Mátyás, Luigi Nassimbeni és Kálmán Alajos* (MTA KK): Sztérikus és elektrosztatikus kölcsönhatások szerepe spontán rezolválódásban
- 13.10 - 13.25 *Böcskei Zsolt* (Chinoin-Sanofi): Modern irányzatok a fehérje-krisztallográfiában és alkalmazásuk a gyógyszerkutatásban