

X. ANYAGSZERKEZET-KUTATÁSI KONFERENCIA

ELTE TTK Kémiai Tanszékcsoport,
Lágymányosi épület, Pázmány Péter sétány 2-4
Budapest, 2005. május 27.

A konferencia programja:

9.00 **Megnyitó** (*Sohár Pál*)

KVANTUMKÉMIA

Üléselnök: Sohár Pál

9.10 - 9.30 *Náray-Szabó Gábor* (MTA, ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék):
Szerkezeti biológia.

9.35 - 9.55 *Mayer István* (MTA KK, Szerkezeti Kémiai Intézet):
Atomi egységfelbontás: egy általános formalizmus a populációs analízis és energiapartíció vizsgálatára.

10.00 - 10.20 *Lukovits István* (MTA KK, Szerkezeti Kémiai Intézet):
Kekule határszerkezetek megszámlálása grafit-rácsokban, nanocsövekben és fullerénekben.

10.25 - 10.45 *Szalay Péter* és *Fogarasi Géza* (ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék):
A citozin tautomerjei és gerjesztett állapotai.

10.50 - 11.10 *Kállay Mihály* (BME Fizikai Kémiai Tanszék):
Automatizált módszerek az elméleti kémiában.

11.15- 11.25 **S z ü n e t**

11.25- 12.00 ***A munkabizottság elnökének megválasztása. Javaslatok és vita a munkabizottság jövőbeli működéséről és feladatairól.***

RÖNTGENDIFFRAKCIÓ

Üléselnök: Fogarasi Géza

12.00 - 12.20 *Czugler Mátyás* és *Párkányi László* (MTA KK, Szerkezeti Kémiai Intézet):
R-AXIS RAPID: új térdetektoros röntgendiffrakciós készülék Magyarországon.

12.25 - 12.45 *Kudar Veronika*,¹ *Simon Kálmán*² és *Sohár Pál*^{1,3} (¹ ELTE TTK Általános és Szeretlen Kémiai Tanszék, ² Chinoín-Sanofi és ³ ELTE-TTK Spektroszkópiai Szerkezetkutató Csoport):
Ferrocénszármazékok szerkezetvizsgálata röntgendiffrakcióval.

13.00 - 14.00 **E b é d s z ü n e t**

NMR ÉS ESR SPEKTROSKÓPIA

Üléselnök: Kubinyi Miklós

- 14.00- 14.20 *Szalontai Gábor* és *Besenyei Gábor* (VE Szerves Kémiai Tanszék):
Kétmagvú Pd(I) és Pt(I) komplexek “fej-fej” és “fej-láb” izomerjeinek azonosítása nulladrendű rotációs rezonanciahatások alapján. ³¹P CP/MAS vizsgálatok.
- 14.25 - 14.45 *Deák Andrea* és *Tárkányi Gábor* (MTA KK, Szerkezeti Kémiai Intézet):
Termikusan indukált metilcsoport vándorlással járó kristály-kristály átalakulások organoon(IV)-komplexek körében.
- 14.50 - 15.10 *Csámpai Antal*, ¹*Vass Elemér* ² és *Sohár Pál* ^{1,3} (¹ ELTE TTK Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék, ² ELTE TTK Szerves Kémiai Tanszék és ³ ELTE–TTK Spektroszkópiai Szerkezetkutató Csoport):
Áthidalt kettős ferrocének konformáció-analízise.
- 11.15 - 15.35 *Rockenbauer Antal* (MTA KK, Szerkezeti Kémiai Intézet):
Kétdimenziós spektrumszimulációs módszerek az ESR spektroszkópiában.
- 15.40 – 15.50 ***S z ü n e t***

OPTIKAI SPEKTROSKÓPIA

Üléselnök: Simon Kálmán

- 15.50 - 16.10 *Keresztury Gábor*, ¹*István Krisztina* ¹ és *Tom Sundius* ² (¹ MTA KK, Szerkezeti Kémiai Intézet és ² Department of Physical Sciences, University of Helsinki):
A skálázott kvantumkémiai erőter módszer alkalmazhatósága a nátriumacetát rezgési spektrumainak számítására.
- 16.15 - 16.35 *Pál Krisztina*, ¹*Baranyai Péter*, ²*Kállay Mihály*, ¹*Kubinyi Miklós*, ¹*Vidóczy Tamás*, ²*Gottfried Grabner* ³ (¹ BME Fizikai Kémiai Tanszék, ² MTA KK, Szerkezeti Kémiai Intézet és ³ Bécsi Egyetem, Szerkezeti Biológiai Intézet):
Indolinszármazékok gerjesztett elektronállapotainak vizsgálata időfelbonásos fluoreszcencia-méréssel.
- 16.40 - 17.00 *Tarczay György*, ¹*Magyarfalvi Gábor*, ¹*Mátyus Edit*, ¹ és *Vass Elemér* ² (¹ ELTE TTK Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék és ² ELTE TTK Szerves Kémiai Tanszék):
Mátrixizolációs spektroszkópia: bioorganikus molekuláktól reaktív gyökökhöz.
- 17.05 - 17.25 *Sztraka Lajos* ¹ és *Veli-Matti Horneman* ² (¹ BME Fizikai Kémiai Tanszék és ² University of Oulu):
Formamid nagyfelbontásos, inverziós IR-átmeneteinek hozzárendelése.
- 17.30 - 17.35 ***Z á r s z ó***