

# XI. ANYAGSZERKEZET-KUTATÁSI KONFERENCIA

MÁTRAFÜRED – 2006. május 23–24.

## 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> : Kisszögű, valamint anomális kisszögű 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 fotokróm tulajdonságai
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>Ebédszünet</i>		

# XI. ANYAGSZERKEZET-KUTATÁSI KONFERENCIA

MÁTRAFÜRED – 2006. május 23–24.

Üléselnök: Mayer István			
Sz1	14.00-14.45	Fogarasi Géza ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék	<u>Fogarasi Géza</u> : Ab initio kvantumkémian 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	Kiralítás (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 <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> 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 restriktív endonukleázok specificitás-csökkenésének okai Mn(II) hatására a Mg(II) ionhoz viszonyítva
9.50-10.05		<i>Szünet</i>	

# XI. ANYAGSZERKEZET-KUTATÁSI KONFERENCIA

MÁTRAFÜRED – 2006. május 23–24.

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 $\text{AlkDyBr}_4$ 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 $^2\text{H}$ 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 foszfaacetilén dimerizációjának mechanizmusa
12.40-12.45		<i>Zárszó</i>	