

**2009. május 13.**

Üléseelnök: Dr. Veszprémi Tamás

11:00-11:20	Dr. Oláh Júlia	Citokrom P450 enzimek modellezése: Az aktív hely 3D-s szerkezetének és az enzim régiószelektivitásának kapcsolata
11:20-11:40	Mátyus Edit	Mátyus Edit, Czakó Gábor, Császár Attila: Általánosított módszerek: variációs alapú magmozgás számításokhoz
11:40-12:00	Fábri Csaba	Fábri Csaba, Czakó Gábor, Császár Attila: Túl a Born-Oppenheimer közelítésen: A $H_2^+$ izotopológjainak rezgései
12:00-12:20	Szidarovszky Tamás	Szidarovszky Tamás, Czakó Gábor, Császár Attila: Effektív algoritmus 3-atomos rendszerek rezgési-forgási szinképének számítására

Ebédszünet

Üléseelnök: Dr. Császár Attila

14:00-14:20	Krámos Balázs	Krámos Balázs, Kovács Attila: Fém-ligandum kölcsönhatások Fe(II)-dioxim komplexekben.
14:20-14:40	Varga Zoltán	Varga Zoltán, Hargittai Magdolna: Vashalogenidek szerkezeti jellegzetességei
14:40-15:00	Dr. Mihály Judith	Szabó Pál, Mink György, Hajba László, Mihály Judith, Mink János: Poliklórozott aromás vegyületek dehalogénezése folyamán keletkezett termékek azonosítása emissziós FTIR spektroszkópiával

Szünet

Üléseelnök: Dr. Kálmán Alajos

15:20-15:40	Dr. Besenyei Gábor	Hollóné Sitkei Eszter, Szalontai Gábor, Lois Isabella, Gömör Ágnes, Pollreis Ferenc, Párkányi László, Hershel Jude, Besenyei Gábor: Önszerveződő palládiumkomplexek. Szintézis, szerkezeti jellemzés, és a sztérikus hatás irányító szerepe.
15:40-16:00	Holczbauer Tamás	Holczbauer Tamás, Németh Csaba, Pfeifer Éva, Mink János, Kerényi Andrea, Keglevich György, Czugler Mátyás: Egy Platina-oxafoszfordin komplex kloroform zárvány szerkezetvizsgálata egykristály diffrakcióval és IR spektroszkópiával

16:00-16:20	Dr. Hajba László	Hajba László, Mink János, Jalilehvand F., Laffin L.J., Berkesi O.: Savas-vizes közegben képződött platina(II) és palládium(II) akvakomplexek elméleti és kísérleti spektroszkópiai jellemzése
-------------	------------------	---

Szünet

Üléseelnök: Dr. Kubinyi Miklós

16:40-17:00	Dr. Kálmán Alajos	A 2,4,6-trifenoxi-1,3,5-triazinok képezte izostrukturális csoportok morfortrópiája
17:00-17:20	Dr. Czugler Mátyás	Öt év eredményei: az R-Axis RAPID egykristálydiffraktométer
17:20-17:40	Dr. Vidóczy Tamás	Pál Krisztina, Gottfried Grabner, Kállay Mihály, Bitter István, Kubinyi Miklós, Gottfried Köhler és Vidóczy Tamás: A cianid-csoporton keresztül létrejövő hidrogénhidas komplex szerepe fluoreszcens jelzőmolekulák fotofizikai tulajdonságaiban

**2009. május 14.**

Üléseelnök: Dr. Kovács Attila

9:00- 9:20	Höltzl Tibor	Höltzl Tibor, Nguyen M. T., Veszprémi Tamás: Szkandiummal dopolt rézklaszterek növekedési mechanizmusa
9:20- 9:40	Németh Balázs	Németh Balázs, Guillemin J.-C., Veszprémi Tamás: Telítetlen foszfinoboránok szerkezete
9:40-10:00	Petrov Klára	Petrov Klára, Veszprémi Tamás: Egzotikus kötések az $Si_3H_4$ izomerekben
10:00-10:20	Nyíri Kinga	Nyíri Kinga, Veszprémi Tamás: Öt- és hattagú gyűrűs szililének szerkezete és stabilitása.
10:20-10:40	Dr. Benkő Zoltán	Benkő Zoltán, Könczöl László, Szieberth Dénes, Nyulászi László: A delokalizáció szerepe foszforvegyületek stabilitásában

Szünet

Üléseelnök: Dr. Mink János

11:00-11:20	Dr. Pál Krisztina	Pál Krisztina, Hess Dóra, Faigl Ferenc, Mátravölgyi Béla, Kállay Mihály, Kubinyi Miklós: Arilpirrol származékok abszolút konfigurációjának meghatározása UV-látható CD-spektroszkópia és kvantumkémiai számítások segítségével
-------------	-------------------	--

11:20-11:40	Mayer Zsuzsa	Mayer Zsuzsa, Kállay Mihály, Kubinyi Miklós: P-királis foszfolénoxidok abszolút konfigurációjának UV/CD spektroszkópiai meghatározása új kvantumkémiai módszerek segítségével
11:40-12:00	Dr. Tarczay György	Indukált kiralitás megfigyelése VCD spektroszkópiával
12:00-12:20	Dr. Hajba László	Hajba László, Mihály Judith, Skripkin M.Yu., Sandström M., Mink János: Karbamid-származékok kvantumkémiai és kísérleti rezgési spektroszkópiai vizsgálata

Ebédszünet

Üléselnök: Dr. Czugler Mátyás

14:00-14:20	Dr. Nemes László	Egy előkészületben levő áttekintő kötet ismertetése: Szénplazmák elméleti és spektroszkópiai vizsgálatai
14:20-14:40	Dr. Pasinszki Tibor	Pasinszki Tibor, Krebsz Melinda, Bazsó Gábor, Tarczay György: Instabil nitril-szulfidok előállítása és szerkezetvizsgálata
14:40-15:10	Dr. Mink János	Mink János, Mihály Judith, Pfeifer Éva, Komlósi Viktória, Illés Bernadett, Gombás Veronika, Hajba László, Héberger Károly, Németh Csaba: Rezgési spektroszkópia és mikroszkópia az orvosi diagnosztikában

## **XII. ANYAGSZERKEZET-KUTATÁSI KONFERENCIA**

**MÁTRAFÜRED - 2009. május 13-14.**

### **Program**

**MTA FKSzKB Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottsága**