

MEGHÍVÓ

Az MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottsága
a Munkabizottság megalakulásának 50. évfordulója alkalmából
szervezett előadóiülésre

Helyszín:

MTA Természettudományi Kutatóközpont Kiselőadó
1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2.

Időpont:

2017. szeptember 21. és 22. (csütörtök és péntek)

NAPIREND

CSÜTÖRTÖK, 2017. szept. 21.		
13:00 – 13:10	A munkabizottsági ülés megnyitása	
13:10– 13:30	Sohár Pál (ELTE Kémia Intézet)	Elnök: Császár Attila
	<i>Visszaemlékezés a MB kezdeti időszakáról, működéséről titkárságom és elnökségem éveiben</i>	
13:30 – 14:00	Kubinyi Miklós (BME VBK)	
	<i>Kubinyi Miklós, Bitter István, Bojtár Márton, Hessz Dóra, Sylvia Rousseva, Szakács Zoltán: Naftálimid származékok fotoredox reakciói</i>	
14:00– 14:20	Mihály Judit (MTA TTK AKI)	
	<i>Önszerveződő lipid rendszerek finomszerkezet-vizsgálata IR spektroszkópiával</i>	
14:20– 14:40	Góger Szabolcs (Pannon Egyetem, Mérnöki Kar)	
	<i>A $HBr+OH \rightarrow H_2O + Br$ reakció sebességének kvantum- és klasszikus mechanikai összetevői</i>	
14:40 – 15:10	<i>Szünet</i>	
15:10 – 15:30	Nagy Péter (MTA-BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport)	
	<i>Hatékony, lineárisan skálázódó CCSD(T) számítások kiterjedt rendszerekre lokális természetes pályák alkalmazásával</i>	
15:30– 15:50	Szidarovszky Tamás (ELTE Kémia Intézet)	
	<i>Többatomos molekulák térbeli irányítása lézerfényvel</i>	
15:50– 16:10	Mezei Pál (BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék)	
	<i>Hibák a sűrűségfüggvény közelítésekkel számított elektronsűrűségben és ezek továbbterjedése a kicserélődési-korrelációs energiába</i>	
16:10 – 16:40	<i>Szünet</i>	
16:40 – 17:10	Lendvay György (MTA TTK)	Elnök: Sztraka Lajos
	<i>Mit tudhatunk meg az elemi reakciók kinetikájáról és dinamikájáról elméleti módszerekkel?</i>	
17:10 – 18:00	Korányi Tamás (MTA Energiatudományi Kutatóközpont)	
	<i>Lignin katalitikus valorizálása</i>	
19:00 –	<i>Vacsora</i>	

PÉNTEK, 2017. szept. 22.

9:00 – 9:30	Császár Attila (ELTE Kémiai Intézet és ELTE-MTA Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport)	Elnök: Kubinyi Miklós
	<i>A spektroszkópiai adatbázisoktól a spektroszkópiai hálózatokig</i>	
9:30 – 10:00	Nemes László (MTA TTK AKI)	
	<i>Szénplazmák infravörös emissziós spektroszkópiája</i>	
10:00 – 10:30	Tarczay György (ELTE Kémiai Intézet)	
	<i>Kémia alacsony hőmérsékletű inert és reaktív mátrixokban</i>	
10:30– 10:50	Nagy Tibor (MTA TTK)	
	<i>Többatomos molekulák rezgési-forgási állapotainak szemiklasszikus kvantálása adiabatikus bekapcsolási technikával.</i>	
10:50 – 11:10	<i>Szünet</i>	
11:10 – 11:40	Bombicz Petra (MTA TTK)	Elnök: Nyulászi László
	<i>Szupramolekuláris kölcsönhatások finomhangolása</i>	
11:40– 12:10	Szalontai Gábor (Pannon Egyetem)	
	<i>Szalontai G, Csonka R, Kaizer J, Bombicz P, J Sabolović: Paramágneses bis(aminosav)réz(II) komplexek 2H MAS NMR spektroszkópiája. NMR krisztallográfiai közelítés.</i>	
12:10 – 12:30	Báthori Nikoletta (CPUT Fokváros, Dél-Afrika)	
	<i>Kristálméternökség több vagy kevesebb sikerrel</i>	
12:30 – 14:20	<i>Ebéd</i>	
14:20 – 14:40	Kelemen Zsolt (BME VBK)	Elnök: Bombicz Petra
	<i>Foszfor tartalmú 3-ferrocénofánok</i>	
14:40 – 15:00	Benedek Zsolt (BME VBK)	
	<i>Négyfogú átmenetifém-ligandumok tervezése légköri nyomású ammóniaszintézishez</i>	
15:00 – 15:20	Mester Dávid (MTA-BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport, BME-VBK Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tsz.)	
	<i>Mester Dávid, Nagy R. Péter és Kállay Mihály: Lokális korrelációs módszerek fejlesztése gerjesztett állapotokra</i>	
15:20 – 15:40	<i>Szünet</i>	
15:40– 16:10	Nyulászi László (BME VBK)	Elnök: Lendvai György
	<i>Aromaticitás vizsgálata heteroatom-tartalmú policiklusos rendszerekben</i>	
16:10 – 16:30	Fábri Csaba (ELTE Kémiai Intézet, Molekulaszerkezet és Dinamika Laboratórium)	
	<i>A CH₅⁺ molekula kvantumdinamikájának vizsgálata a GENIUSH programcsomag segítségével</i>	
16:30– 17:00	Mayer István (MTA TTK)	
	<i>Egy elvi probléma a végesbázisú sűrűségfüggvény-elméletben</i>	
17:00 - 17:05	<i>Zárszó</i>	