

MEGHÍVÓ

Az MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottsága
szervezésében tartandó előadóülésre.

Helyszín:

Mátrafüredi Akadémiai Üdülő, 3232 Mátrafüred, Akadémia u. 1-3.

Időpont:

2013. október 17 – 19 (csütörtök - szombat)

NAPIREND

CSÜTÖRTÖK, 2013. okt. 17.		
16:45 – 17:00	A munkabizottsági ülés megnyitása	
17:00 – 17:30	Túri László (ELTE Kémiai Intézet)	Elnök: Kovács Attila
	<i>Vízfürt anionok gerjesztett állapota élettartamának számítása molekuladinamikai szimulációkból</i>	
17:30 – 18:00	Daru János (MTA TTK)	
	<i>Átmenetifém katalizált reakciók mechanizmusának vizsgálata</i>	
18:00 – 19:00	<i>Vacsora</i>	
PÉNTEK, 2013. október 18.		
9:00 – 9:30	Szidarovszky Tamás (MTA-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport)	Elnök: Surján Péter
	<i>Rezgési-forgási rezonanciaállapotok</i>	
9:30 – 10:00	Hessz Dóra (MTA-TTK Molekuláris Farmakológiai Intézet)	
	<i>Hidroxiflavon vegyületek alkalmazása ATP-felismerő fluoreszcens szenzorként</i>	
10:00 – 10:30	Kovács Attila (Institute for Transuranium Elements, Karlsruhe, Németo.)	
	<i>Geometria trendek aktinida vegyületekben</i>	
10:30 – 11:00	<i>Kávészünet</i>	
11:00 – 11:30	Czakó Gábor (ELTE Kémiai Intézet)	
	<i>Hatatomos rendszerek dinamikája</i>	
11:30 – 12:00	Halász Gábor (Debreceni Egyetem)	
	<i>Lézerrel indukált kónikus kereszteződések: kvantum interferencia hatás</i>	
12:00 – 14:00	<i>Ebédészünet</i>	

PÉNTEK, 2013. október 18.			
14:00 – 14:30		Nagy Ágnes (Debreceni Egyetem)	Elnök: Császár Attila
		<i>Gerjesztett állapotok sűrűségfüggvény elmélete</i>	
14:30 – 15:00		Szabados Ágnes (ELTE Kémiai Intézet)	
		<i>Lokális spin stúdium: az APSG hullámfüggvény és ennek perturbációs korrekciója</i>	
15:00 – 15:30		Vibók Ágnes (Debreceni Egyetem)	
		<i>Attoszekundumos elektron és mag kvantumdinamika az ózon molekulában</i>	
15:30 – 16:00	<i>Kávészünet</i>		
16:00 – 16:30		Hamza Andrea (MTA TTK)	
		<i>Hidrogén aktiválás frusztrált Lewis párokkal: reaktivitási modellek</i>	
16:30 – 17:00		Bakó Imre (MTA TTK)	
		<i>Hidrogén aktiválás vizsgálta frusztrált komplexeken metadinamiki számítások segítségével</i>	
17:00 – 17:30		Surján Péter (ELTE Kémiai Intézet)	
		<i>TBA</i>	
17:30 – 18:00		Mayer István (MTA TTK, Budapest)	
		<i>Kémiai információk kinyerése molekulák hullámfüggvényéből – néhány újabb eredmény</i>	
18:00 – 19:00	<i>Vacsora</i>		

SZOMBAT, 2013. okt. 19.			
9:00 – 9:45		Tarczay György (ELTE Kémiai Intézet)	Elnök: Kubinyi Miklós
		<i>Kísérleti és elméleti molekulaszervezeti vizsgálatok (MTA doktora cím elővédés)</i>	
9:45 – 10:15		Halmi Bence (BMGE)	
		<i>A kinaldin és a 6-cianokinaldin fluoreszcens jelzőmolekulák spektroszkópiai jellemzése</i>	
10:15 – 10:45	<i>Kávészünet</i>		
10:45 – 11:15		Sarka János (ELTE Kémiai Intézet)	
		<i>A H_5^+ rezgési-forgási spektroszkópiája</i>	
11:15 – 11:45		Madarász Ádám (MTA TTK)	
		<i>Organokatalitikus Michael-addíció elméleti és kísérleti vizsgálata</i>	
11:45 – 12:00	A munkabizottsági ülés bezárása		
12:00–	<i>Ebéd</i>		