

# MEGHÍVÓ

Az MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottsága  
szervezésében tartandó előadóra és  
a 80 éves Kálmán Alajos professzor úr köszöntésére

## Helyszín:

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

## Időpont:

2015. február 27 – 28. (péntek – szombat)

# NAPIREND

<b>PÉNTEK, 2015. feb. 27.</b>		
13:10 – 13:20	<b>A munkabizottsági ülés megnyitása</b>	
13:20 – 13:50	<b>Kubinyi Miklós</b> (BME, MTA TTK)	Elnök: Nyulászi László
	<i>"Jelátvitel" fluoreszcens szenzormolekulákban</i>	
13:50 – 14:10	<b>Mester Dávid</b> (BME - VBK - Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Spektroszkópia csoport)	
	<i>Fluoreszcens nukleotid szenzor szelektivitásának kvantumkémiai és spektroszkópiai vizsgálata</i>	
14:10 – 14:30	<b>Szakács Zoltán</b> (MTA TTK)	
	<i>Pillér[5]arén komplexképzése fluoreszcens stilbazólium festékekkel</i>	
14:30 – 15:00	<b>Náray-Szabó Gábor</b> (ELTE Kémia Intézet)	
	<i>A számítási kémia fejlődése Dirac-tól Warshel-ig</i>	
15:00 – 15:20	<i>Szünet</i>	
15:20 – 15:40	<b>Bortel Gábor</b> (MTA Wigner)	Elnök: Bombicz Petra
	<i>Diffrakciós szerkezetmeghatározás kristályok nélkül</i>	
15:40 – 16:00	<b>Pekker Sándor</b> (MTA Wigner)	
	<i>Illeszkedéskontroll fullerén kokristályokban</i>	
16:00 – 16:20	<b>Kováts Éva</b> (MTA Wigner)	
	<i>Új fémorganikus vázszerkezetek</i>	
16:20 – 16:40	<b>Holczbauer Tamás</b> (MTA TTK)	
	<i>Kristályosítási eljárások fejlesztése, szilárd fázisú molekuláris társulások létrehozása</i>	
16:40 – 17:00	<i>Szünet</i>	

17:00 – 17:30	<b>Faigel Gyula</b> (MTA Wigner)	Elnök: Náray-Szabó Gábor
	<i>Az SZFKI Röntgendiffrakciós Laboratórium bemutatása</i>	
17:30– 18:00	<b>Bombicz Petra</b> (MTA TTK)	
	<i>Izostrukturalitás – morfológia – polimorfia és dezmotrópia, KA 70-80</i>	
18:00 – 18:20	<b>Sohár Pál</b> (ELTE Kémia Intézet)	
	<i>Párhuzamos életútjaink</i>	
18:30 – 19:30	<i>Vacsora</i>	
19:30 – 20:15	<b>Kálmán Alajos</b> (MTA TTK)	Az ünnepelt előadása
	<i>A Nyugat Katedrálisai</i>	

### SZOMBAT, 2015. február 28.

9:00 – 9:50	<b>Czakó Gábor</b> (MTA-ELTE Kémiai Intézet)	Elnök: Császár Attila
	<i>Kémiai reakciók dinamikája ab initio potenciális energia felületeken (MTA doktora fokozat elővédése)</i>	
9:50 – 10:10	<b>Vörös Tamás</b> (ELTE Kémiai Intézet)	
	<i>[2C, 2N, X] (X = S, Se) izomerek vizsgálata mátrixizolációs IR spektroszkópiával</i>	
10:10 – 10:30	<b>Najbauer Eszter</b> (ELTE Kémiai Intézet)	
	<i>Glicin-víz és citozin-víz komplexek szerkezetvizsgálata NIR-lézer- besugárással kombinált mátrixizolációs IR spektroszkópiával</i>	
10:30 – 10:50	<i>Szünet</i>	
10:50 – 11:10	<b>Szabó István</b> (ELTE Kémiai Intézet)	Elnök: Mayer István
	<i>Retenciós mechanizmusok a F- + CH<sub>3</sub>Cl ---&gt; CH<sub>3</sub>F + Cl- S<sub>N</sub>2 reakcióra</i>	
11:10– 11:30	<b>Kelemen Zsolt</b> (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék)	
	<i>Karbének szerepe molekulák reaktivitásának megváltoztatásában — molekulahangolás</i>	
11:30 – 11:50	<b>Lábas Anikó</b> (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék)	
	<i>Egy pontmutáció hatása a PfCCT MΔK dimer fehérje szerkezetére és működésére</i>	
11:50– 12:10	<b>Bihari Tamás</b> (MTA TTK)	
	<i>Indol funkcionálizálás mechanisztikus vizsgálata</i>	
12:10 – 12:30	<b>Bakó Imre</b> (MTA TTK)	
	<i>Kooperativitás víz klaszterekben</i>	
12:30 – 12:40	<i>Zárszó</i>	