

MEGHÍVÓ

Az MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság és az MTA Szervetlen és Fémorganikus Kémiai Munkabizottság szervezésében tartandó előadóülésre.

Helyszín:

Lovas Udvarház Panzió, 7056 Szedres, Apáti-puszta

Időpont:

2012. október 12 – 14 (péntek - vasárnap)

NAPIREND

2012. október 12. (péntek)

Szekció 1. Elnök: Sohár Pál

14:00-14:10 – Megnyitó

14:10-14:45 – Kálmán Alajos, Czugler Mátyás: Simon Kálmán emlékére

14:45-15:10 – Harmat Veronika, Kiss-Szemán Anna, Orgován Zoltán, Karancsiné Menyhárd Dóra, Szamosi Ilona, Náray-Szabó Gábor, Polgár László: Acilpeptid hidrolázok szerkezetvizsgálata: az enzimaktivitás és a méretszelektivitás együttes mechanizmusa

15:10-15:35 – Holczbauer Tamás, Szabó Máté, Tóth Viola Róza, Czugler Mátyás: Kristályos drotaverin sók előállítása

15:35-16:00 – Bombicz Petra, Petra Smie, Ewald Sattler: Minek nevezzetek: egykomponensű ko-kristály?

16:00-16:30: Szünet

Szekció 2. Elnök: Kubinyi Miklós

16:30-16:55 – Kubinyi Miklós: Emlékezés Grofcsik Andrásra

16:55-17:20 – Baranyai Péter, Besenyei Gábor, Bitter István, Kubinyi Miklós, Kunsági-Máté Éva, Párkányi László: Arany(I) komplexek lumineszcenciája: nem mind arany, ami fénylik

17:20-17:45 – Georg Mellau: A [H,C,N] molekuláris rendszer rezgési-forgási energiaszintjeinek szerkezete

17:45-18:10 – Károlyi Benedek, Kiss Kolos, Palló Anna, Holczbauer Tamás, Czugler Mátyás, Drahos László, Sohár Pál, Csámpai Antal: Ferrocenil-tiazol szintézise, gyűrű-transzformációs átalakítása

18:10-18:35 – Bazsó Gábor, Najbauer Eszter, Góbi Sándor, Magyarfalvi Gábor, Tarczay György: Aminosav konformerek azonosítása és a nagy energiájú konformerek élettartamának meghatározása mátrixizolációs és lézer technikákkal

18:45: Vacsora

2012. október 13. (szombat)

Szekció 3. Elnök: Kovács Ilona

9:00-9:25 – Szalay Roland, Párkányi László, Rohonczy János, Kuzmann Ernő, Kárpáti Szilvia: Egy érdekes ón(IV)-organikus vegyület: 1-tributilsztannil-2-pirrolidon

9:25-9:50 – Kiss Kolos, Holczbauer Tamás, Czugler Mátyás, Csámpai Antal: Formil-ferrocén reakciói Hantzsch-gyűrűzárás körülményei között

9:50-10:15 – Szilvási Tibor: Nagy térkitöltésű csoportok katalitikus hatása a Suzuki-reakcióban

10:15-10:40 – Vörös Tamás, Bazsó Gábor, Góbi Sándor, Tarczay György: [H,C,N,Se] izomerek vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával

10:40-11:10: Szünet

11:10-11:35 – Kovács Attila, Pogány Péter, R. J. M. Konings: Aktinida dikarbid molekulák jellegzetes tulajdonságai

11:35-12:00 – Pogány Péter, Kovács Attila, R. J. M. Konings: Aktinida tetrakarbidok szerkezete

12:00-12:25 – Tóth Zsuzsanna, Zoboki Tamás, Szabados Ágnes, Surján Péter: Molekulafragmens UV-VIS átmeneteinek számítása fagyasztott lokalizált molekulapálya módszerrel

12:30: Ebéd

Szekció 4. Elnök: Császár Attila

15:00-15:25 – Szalay Viktor: Diszkrét változós reprezentációk

15:25-15:50 – Nyulászi László: Szervetlen halogenidek hidrolízise

15:50-16:15 – Bakó Imre: Folyékony víz AIMD vizsgálata

16:15-16:40 – Czákó Gábor: Alapvető bimolekuláris kémiai reakciók dinamikája

16:40-17:10: Szünet

17:10-17:35 – Jeszenszki Péter, Surján Péter, Szabados Ágnes: Egy multireferenciás perturbációs módszer spin-adaptálásának buktatói

17:35-18:00 – Mátyus Edit: Molekulaszerkezet számítás a Born–Oppenheimer-közelítés nélkül

18:00-18:25 – Daru János, Stirling András: Új eljárás sebességi együttható számítására molekuladinamika szimulációkból

18:25-18:50 – Szalay Péter: A DNS alkotórészei gerjesztett állapotainak tanulmányozása magasszintű kvantumkémiai módszerekkel

19:00: Vacsora

2012. október 14. (vasárnap)

Szekció 5. Elnök: Pasinszki Tibor

9:00-9:25 – Hollóczki Oldamur, Kelemen Zsolt, Annegret Stark, Nyulászi László, Barbara Kirchner: Szén dioxid - ionos folyadék rendszerek elméleti vizsgálata

9:25-9:50 – Pacsai Bálint, Májusi Gábor, Krebsz Melinda, Pasinszki Tibor: Szelenadiazolok előállítás

9:50-10:15 – Kovács Ilona, E. Sattler: Litiumdifoszfánidok szerkezeti variációi kristályban és oldatban.

10:15-10:40 – Kelemen Zsolt: Foszfinokarbénből abnormális karbénkomplex

10:40-11:05 – Csókás Dániel, Károlyi Benedek, Drahos László, Csámpai Antal: Ferrocéntartalmú potenciális organokatalizátorok szintézise

11:05-11:35: Szünet

11:35-12:00 – Purgel Mihály, Joó Ferenc, Voronova Krisztina: A palladium(II)-szulfoszalán – hex-1-én-3-ol rendszer vizsgálata DFT módszerrel

12:00-12:25 – Fekete Csaba: Szilolid anion és komplexei

12:25-12:50 – Könczöl László: Egy érdekes $\eta^2 - H_2$ difoszfinoborán komplex

12:50-13:15 – Nagy Péter, Szabados Ágnes, Surján Péter: Pi-elektronrendszer hozzájárulása a rezgési optikai aktivitás intenzitáshoz

13:15-13:40 – Krámos Balázs: Az enolizációs lépés vizsgálata az ösztrogének bioszintézisében

13:40-13:45 – Zárás

13:45: Ebéd