



MEGHÍVÓ

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága soron következő tudományos ülését 2022. május 19-20-án a **Balatonvilágosi Akadémiai Üdülő**ben (Balatonvilágos, Rákóczi út 31.) tartja, amelyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés kevert jelenléti-világhálós formában kerül megrendezésre, az alábbi programpontok szerint. Minden előadás a Zoom szolgáltatás segítségével a világhálón keresztül is követhető lesz, illetve az előadók egy része nem a helyszínen fog előadni (ezen előadások programbeli jelölése: ). **Az ülésen való jelenléti részvételre 2022. május 11., szerda 12 óráig lehet jelentkezni** az utolsó oldalon található jelentkezési lappal, amelyet kitöltve a nagy.tibor@ttk.hu e-mail címre kérünk elküldeni. Online részvételhez a munkabizottság levelezőlistáján szereplőknek nem kell regisztrálniuk. Más érdeklődőktől azt kérjük, hogy a nevüket és az intézetük nevét előzetesen küldjék el a nagy.tibor@ttk.hu címre. További információk a helyszínnel, a szállással, az odautazással, illetve a webináriumhoz való csatlakozással kapcsolatban a program után találhatók.

PROGRAM

Május 19., csütörtök

10:00 **Megnyitó (5 perc)**

Tóth Ágota, elnök

Szégedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

10:05 **Ammóniumion klórozása savas közegben (15+10 perc)**

Kiss Eszter, Simon Fruzsina, Szabó Mária és Fábíán István

Debreceni Egyetem, TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MTA - DE Redoxi- és homogén katalitikus reakciók mechanizmusa kutatócsoport

10:30 **Molecular dynamics aided green transition of the chemical industry. Molecular-level understanding of membrane permeation of some chemicals (15+10 perc)**

Zsófia B. Rózsa and Dr. Milán Szőri

Institute of Chemistry, University of Miskolc

10:55 **SZÜNET (10 perc)**

11:05 **Az elmélet és kísérlet együttműködése: a $F^- + CH_3CH_2Cl$ szubsztitúciós és eliminációs reakciók versengő dinamikája (10+5 perc)**



Tajti Viktor, Győri Tibor és Czakó Gábor

Szégedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

11:20 **Formation of periodic precipitation patterns by pH-induced aggregation of gold nanoparticles (20+10 perc)**

Masaki Itatani¹, Qing Fang², István L. Lagzi¹ and Hideki Nabika²

¹ Department of Physics, Budapest University Of Technology And Economics

² Yamagata University, Yamagata, Japan

11:50 **SZÜNET (10 perc)**

12:00 **Preliminary presentation of PhD thesis work: Investigation of nucleation kinetics and flow-driven crystallization of lithium phosphate (20+10 perc)**

Michael Emmanuel

Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged

12:30 **EBÉD (90 perc)**

- 14:00  **Oldott marha szérum albumin (BSA) szorpciója szilika aerogélen: Kinetika, mechanizmus (15+5 perc)**
Kalmár József, Forgács Attila és Fábíán István
Debreceni Egyetem, TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MTA - DE Redoxi- és homogén katalitikus reakciók mechanizmusa kutatócsoport
- 14:20  **A foszfor, mint központi atom S_N2 és proton-transzfer reakcióban: a $F^- + PH_2Cl$ reakció dinamikájának elméleti modellezése (10+5 perc)**
Giricz Anett, Papp Dóra és Czákó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 14:35 **Leucin és izoleucin oxidációja hipoklórossavval: kinetika és mechanizmus (15+10 perc)**
Simon Fruzsina, Grolmusz Fanni, Fábíán István és Szabó Mária
Debreceni Egyetem, TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MTA - DE Redoxi- és homogén katalitikus reakciók mechanizmusa kutatócsoport
- 15:00 **SZÜNET (10 perc)**
- 15:10 **Efficient numerical methods for the optimization of large kinetic reaction mechanisms (15+5 perc)**
Simret Goitom¹, Máté Papp², Márton Kovács², Tibor Nagy³, István G. Zsély², Tamás Turányi² and László Pál⁴
¹ *Institute of Mathematics, Eötvös Loránd University, Budapest*
² *Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest*
³ *Institute of Materials and Environmental Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, ELKH, Budapest*
⁴ *Department of Economic Sciences, Sapientia University, Miercurea Ciuc (Csíkszereda), Romania*
- 15:30 **A hipoklórossav reakciója kloritonnal savas közegben (15+10 perc)**
 Angyal Dávid, Szabó Mária és Fábíán István
Debreceni Egyetem, TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MTA - DE Redoxi- és homogén katalitikus reakciók mechanizmusa kutatócsoport
- 15:55 **SZÜNET (10 perc)**
- 16:05  **Determinisztikus közelítés a nanorészecske-képződés göcképződési-növekedési modelljére: összehasonlítás a sztochasztikus eredményekkel (15+5 perc)**
Szabó Rebeka és Lente Gábor
Pécsi Tudományegyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudomány Tanszék
- 16:25 **Ciklikus alkil-amino-karbén (CAAC) ruténiumkomplex metatézis katalizátorok rendkívüli aktivitásának elméleti értelmezése (20+5 perc)**
 Deme János, Tuba Róbert és Nagy Tibor
ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest
- 16:50 **SZÜNET (10 perc)**
- 17:00 **Comparison of methane combustion mechanisms based on large amount of species concentration measurements (15+5 perc)**
Peng Zhang¹, István G. Zsély¹, Máté Papp¹, Tibor Nagy² and Tamás Turányi¹
¹ *Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest*
² *Institute of Materials and Environmental Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, ELKH, Budapest*
- 17:20  **Bipoláris és multipoláris reakció-diffúzió rendszerek (20+10 perc)**
 Szalai István
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Budapest
- 17:50 **SZÜNET (10 perc)**
- 18:00 **Piridin alapvázú ligandumok réz(II)-komplexei: SOD mimetikumok (15+10 perc)**
Diószegi Róbert, Fábíán István és Lihi Norbert
Debreceni Egyetem, TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MTA - DE Redoxi- és homogén katalitikus reakciók mechanizmusa kutatócsoport
- 18:25 **Kinetikai görbék közelítése véges tagszámú polinomok alapján (20+10 perc)**
Lente Gábor, Alexandra Fursenko, Anirudh Karpakala Sanjeev Kumar és Szabó Rebeka
Pécsi Tudományegyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudomány Tanszék
- 18:55 **VACSORA (65 perc)**
- 20:00 **Sugárkémia és a civakodó viktóriánusok (esti előadás)**
 Schiller Róbert
ELKH Energiatudományi Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet

Május 20., péntek

REGGELI

- 9:00 **„Csak a betűket nem ismerem” (A determinisztikus reakciókinetika alapjairól) (15+5 perc)**
Tóth János
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Analízis Tanszék
- 9:20 **Comparison of the performance of ethylene combustion mechanisms based on large number of indirect measurements (15+5 perc)**
Boyang Su¹, Máté Papp¹, István G. Zsély¹, Peng Zhang¹, Márton Kovács¹, Tibor Nagy² and Tamás Turányi¹
¹ *Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest*
² *Institute of Materials and Environmental Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, ELKH, Budapest*
- 9:40 **Ellentétes töltésű nanorészecskék csapadékképződésének vizsgálata (20+10 perc)**
Lagzi István László^{1,2}, Masaki Itatani¹, Holló Gábor², Deák András³ és Hideyuki Nakanishi⁴
¹ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék*
² *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport, Budapest*
³ *ELKH Energiatudományi Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet, Budapest*
⁴ *Kyoto Institute of Technology, Department of Macromolecular Science and Engineering, Kiotó, Japán*
- 10:10 **SZÜNET (10 perc)**
- 10:20 **A kén promóter szerepének vizsgálata a szén nanocső képződésben (15+5 perc)**
 Orbán Balázs¹ és Hóltzl Tibor^{2,3}
¹ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*
² *Furukawa Electric Technológiai Intézet, Budapest*
³ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, MTA-BME Számítógéprezézelt Kémia Kutatócsoport*
- 10:40 **A soküzemanyag NUIGMech égési mechanizmus pentanol kémiájának mechanizmusredukcióval elősegített kinetikaiparaméter-optimalizációja (15+5 perc)**
Horváth László¹, Dong Shijun², Saggese Chiara³, Papp Máté⁴, Curran Henry J.², Pitz William J.³, Turányi Tamás⁴, Nagy Tibor¹
¹ *ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*
² *Combustion Chemistry Centre, National University of Ireland, Galway, Írország*
³ *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Budapest*
⁴ *Materials Science Division, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, Amerikai Egyesült Államok*
- 11:00 **Zeolit típusú imidazolát vázszerkezetek (ZIF-8, ZIF-67) kialakítása glicerín-karbonát oldószerben (15+5 perc)**
Német Norbert¹, Masaki Itatani¹, Schusztér Gábor², Raffaele Cucciniello³, Pierandrea Lo Nostro⁴, Federico Rossi³ és Lagzi István László^{1,5}
¹ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék*
² *Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék*
³ *University of Siena, Siena, Olaszország*
⁴ *University of Florence, Florence (Firenze), Olaszország*
⁵ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport*
- 11:20 **SZÜNET (10 perc)**
- 11:30 **A Cl + CH₃CN reakció absztrakciós és szubsztitúciós útvonalainak nagy pontosságú kvantumkémiai feltérképezése (10+5 perc)**
 Tóth Petra, Szűcs Tímea és Czákó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 11:45 **Homogén reakciókinetikai tartományok a metán-levegő elegyek gyulladásánál (15+5 perc)**
Valkó Éva^{1,2}, Papp Máté², Zhang Peng² és Turányi Tamás²
¹ *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Matematikai Intézet, Budapest*
² *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Budapest*
- 12:05 **Programmable self-assembly of chitosan hydrogel (20+10 perc)**
Pawan Kumar, Dezső Horváth and Ágota Tóth
Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged
- 12:35 **EBÉD**

Budapest, 2022. május 6.

Tisztelettel,

Tóth Ágota, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság elnöke
Nagy Tibor, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság titkára

Webinárium információk

Az ülést a Zoom Meetings szolgáltatásának segítségével tartjuk.

Az „RKFB tavaszi ülése” Zoom üléshez csatlakozni az alábbi link:

<https://us02web.zoom.us/j/83966698721?pwd=WTY2NCtNU2Q2azNxbzRoWlpmWmg1dz09>

vagy a <https://zoom.us/join> weboldalon az alábbi azonosítási információk segítségével lehetséges:

Meeting ID: 839 6669 8721

Passcode: 282001

Ha korábban nem telepítettük a Zoom kliens programot, akkor a link illetve a weboldal egy kliens program letöltését fogja felajánlani, aminek pillanatok alatt elvégezhető letöltése és telepítése után csatlakozhatunk az üléshez.

Minden csatlakozótól kérnénk, hogy a „Your name”-ként adja meg a teljes nevét és zárójelben az intézetét.

Például: Fül Elek (Nemzeti Tökmagkutató Intézet).

Helyszín, szállás és utazási információk

A munkabizottsági ülés helyszíne a Balatonvilágosi Akadémiai Üdülő

<https://udulo.mta.hu/uduloink/balatonvilagosi-akademiai-udulo>

Cím: 8171 Balatonvilágos, Rákóczi út 31.

GPS koordináták: É 46°57'21.91" K 18°09'00.58"

E-mail: vilagos@udulo.mta.hu

Telefon: (88) 480-851

Megközelítés autóval:

Budapest felől érkezve az M7-es autópályáról a 90-es csomópontnál (Balatonvilágos / Enying / Balatonakarattya) kell lemenni. Balatonaligára az Aligai úton behajtva át kell menni a vasúti átjárón, majd továbbmenni előbb a Dózsa György, majd a Dobó István utcán. A Balaton partja felé az Ady Endre (majd Vasútállomás) utcán célszerű lemenni, egy újabb vasúti átjáró keresztezése után itt kezdődik a Rákóczi út, amelyen a tóparti oldalon mintegy 500 méterre találhatók a Balatonvilágosi Akadémiai Üdülő piros-fehér épületei.

Megközelítés vonattal érkezőknek:

A Balatonvilágosi Akadémiai Üdültől 1,1 kilométerre található Balatonvilágos vasúti megállóhelye (az autós leírást végét lehet követni). Ideális vonatos utazási lehetőségnek tűnik a Déli Pályaudvarról 8:05-kor induló vonat, amely Kelenföldön 8:12-kor, Balatonvilágoson pedig 9:29-kor áll meg. Hasonló járat indul (Siófok vagy Balatonszentgyörgy végállomásokkal) kétóránként a Déli pályaudvarról egész nap (10:05...18:05 → 11:29...19:29). Visszafelé közvetlen járat a Déli pályaudvarra 6:02-kor, majd kétóránként 8:26...20:26-kor, végül 22:13-kor indul a Déli pályaudvarra közel másfél órás menetidővel. Az autóbusz megközelítések nem kedvezőek, a vonathoz képest több az átszállás és lényegesen hosszabb a menetidő.

Balatonvilágoson áthaladó vonatok teljes listája:

május 19.

<https://jegy.mav.hu/menetrend/allomas?a=005503327&d=2022-05-18T22:00:00.000Z&lang=hu>

május 20.

<https://jegy.mav.hu/menetrend/allomas?a=005503327&d=2022-05-19T22:00:00.000Z&lang=hu>

JELENTKEZÉSI LAP

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága
2022. május 19-20-án a Balatonvilágosi Akadémiai üdülőben tartandó ülésére.

**Elektronikusan kitöltve beküldendő: nagy.tibor@ttk.hu email címre
2022. május 11., szerda 12 óráig.**

Név:

Intézmény:

Az ülés következő napjain kívánok részt venni (nem kötelező megadni, kötelezettség nélkül):

Online részvétel	[]
Jelenléti részvétel május 19-én délelőtt/délután	[]/[]
Jelenléti részvétel május 20-én délelőtt	[]

Jelenléti részvétel esetén szállás és ellátási igények:

Nem kérek szállást és ellátást	0.Ft/fő	[]
Szállás teljes ellátással IFÁ-val	28.200.Ft/fő	[]

részleges igény esetén:

május 19-én ebéd (3 fogásos)	3.800.Ft/fő	[]
május 19-én vacsora (2 fogásos)	3.200.Ft/fő	[]
május 19-én szállás + reggeli [16.900 Ft] + IFA [500 Ft]	17.400.Ft/fő	[]
május 20-én ebéd (3 fogásos)	3.800.Ft/fő	[]

Vegetáriánus étkeztetést szeretnék kérni: []

A feltüntetett árak az ÁFÁ-t tartalmazzák.

Az elhelyezést 2-3-4 ágyas szobákban fog történni. Korlátozott számban lehetőség van külön szobát kérni. Az elhelyezést alábbi személyekkel kérem közös

szobában (kölsönös megjelölést kérnénk):
.....

További szállás és ellátás igények (korábban érkezés, továbbmaradás esetén):

Számlázási adatok:

Név:

Cím:

Adószám:

Előreutalásos, készpénzes, bankkártyás és szépkártyás [utóbbi nem lesz elszámolható!] fizetési módokra van lehetőség.

Előreutalással szeretnék fizetni: []

Kérés a számlázással kapcsolatban:

....., 2022. május nap

.....
aláírás