



MEGHÍVÓ

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága soron következő tudományos ülését 2022. október 27-28-án a Mátrafüredi Akadémiai Üdülőben (3232 Mátrafüred, Akadémia utca 1-3.) tartja, amelyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés kevert jelenléti-online 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. október 17-e 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 tájékoztatásképpen. További információk a helyszínnel, a szállással, az utazással, illetve a webináriumhoz való csatlakozással kapcsolatban a program után találhatók.

PROGRAM

Október 27., csütörtök

12:30 **EBÉD (60 perc)**

13:30 **Megnyitó (5 perc)**

Tóth Ágota elnök

SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szeged

13:35 **Egy érdekes kvantumeffektus a HBr és OH ill. CH₃ gyökkel lejátszódó reakciójában (15+5 perc)**

Lendvay György

Természetudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest

13:55 **Az előadás címe: ZIF fémorganikus térhálók különböző polimorfjainak előállítása termodinamikai és kinetikai szabályozással (15+5 perc)**

Balog Edina¹, Varga Gábor¹, Kukovecz Ákos², Tóth Ágota¹, Horváth Dezső², Lagzi István³ és Schusztér Gábor¹

¹ Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szeged

² Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Szeged

³ Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék, Budapest

14:15 **SZÜNET (10 perc)**

14:25 **A CH₄.Ar és a CH₄.F⁻ komplexek rezgési dinamikája spektroszkópiai minőségű potenciálisenergia-felületeken (15+5 perc)**

Papp Dóra¹, Tajti Viktor¹, Avila Gustavo², Mátyus Edit² és Czákó Gábor¹

¹ Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, Szeged

² Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Budapest

14:45 **Applying Periodic Temperature Forcing to Synthesis of Gold Nanoparticles with a Citrate Reduction Method (15+10 perc)**

Masaki Itatani¹, Hugh Shearer Lawson¹, Dániel Zámbo², András Deák² and István Lagzi^{1,3}

¹ Budapest University of Technology and Economics, Budapest, Hungary

² Institute of Technical Physics and Materials Science, Budapest, Hungary

³ ELKH-BME Condensed Matter Research Group, Budapest, Hungary

15:10 **SZÜNET (10 perc)**

15:20 **A normál módus képen túl: reaktánsmolekula-rezgések csatoltságának fontossága kváziklasszikus trajektóriaszámításokban (20+5 perc)**

Nagy Tibor, Lendvay György

Természetudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest

- 15:45 **ZIF-8 vázszerkezet kristálynövesztése és visszaoldódása: nem autonóm-oszcillátor tervezése és gélfázisú mintázatok kialakítása (15+10 perc)**
Német Norbert¹, Lawson Hugh Shearer¹, Holló Gábor², Fonyi Máté Sándor¹, Lagzi István^{1,2}
¹ BME, Fizika Tanszék, Önrendeződés és Önszerveződés Kutatócsoport, Budapest
² ELKH-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport, Budapest
- 16:10 **SZÜNET (10 perc)**
- 16:20 **Egy új aktív paraméter kiválasztási módszer égési mechanizmusok hatékony optimalizációjára (20+5 perc)**
Kovács Márton¹, Papp Máté¹, Turányi Tamás¹ és Nagy Tibor²
¹ Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémia Intézet, Budapest
² Természetudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest
- 16:45 **Zeolitszerű imidazolát vázszerkezetek reakciós-diffúziós jelenségei (15+5 perc)**
 Farkas Szabolcs
 BME, Fizika Tanszék, Önrendeződés és Önszerveződés Kutatócsoport, Budapest
- 17:05 **SZÜNET (10 perc)**
- 17:15 **Dehidrogénezett és protonált aminosavak ab initio konformeranalízise (15+5 perc)**
Nacsá András, Orján Erik és Czákó Gábor
 Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, Szeged
- 17:35 **A közeg polaritásának hatása kémiai csapadékmintázatokra (15+10 perc)**
Lagzi István^{1,2}, Masaki Itatani¹, Holló Gábor², Zámbo Dániel³ és Deák András³
¹ BME, Fizika Tanszék, Önrendeződés és Önszerveződés Kutatócsoport, Budapest
² ELKH-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport, Budapest
³ Energiatudományi Kutatóközpont, Budapest
- 18:00 **VACSORA (60 perc)**
- 19:00 **A Texus-57 rakétakampány és az odavezető út: kísérletek súlytalanságban (~60 perc)**
 Horváth Dezső
 Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Október 28., péntek

- 7:30- **REGGELI**
- 9:00 **Különleges, gyökös illetve nukleofil szubsztitúcióval lejátszódó fotodehalogéneződési reakciók kinetikája két nehezen lebomló aromás vegyület esetében (20+10 perc)**
Demeter Attila¹, Krakkó Dániel², Illés Ádám¹, Domján Attila¹, Dóbbé Sándor¹ és Záray Gyula²
¹ Természetudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest
² Eötvös Loránd Tudományegyetem, Analitikai Kémiai Tanszék, Budapest
- 9:30 **Részletes ammónia égéskinetikai reakciómechanizmusok tesztelése nagyméretű NH₃/H₂ és NH₃/H₂/CO kísérleti adatgyűjteményen (15+5 perc)**
Szanthoffer András György, Zsély István Gyula, Kawka László, Papp Máté és Turányi Tamás
 Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémia Intézet, Budapest
- 9:50 **SZÜNET (10 perc)**
- 10:00 **Self-propelled calcium-alginate beads (10+10 perc)**
 Réka Samu-Zahorán, Pawan Kumar, Dezső Horváth, Ágota Tóth
 Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szeged
- 10:20 **Imin hidrolízisen alapuló pH-oszcillátor modellezése (10+10 perc)**
 Lantos Emese, Horváth Dezső és Tóth Ágota
 Szegedi Tudományegyetem, Kémia Intézet, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szeged
- 10:40 **Az OH + C₂H₆ reakció dinamikája egy automatikusan fejlesztett potenciálisenergia-felületen (15+5 perc)**
Gruber Balázs, Tajti Viktor és Czákó Gábor
 Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, Szeged
- 11:00 **SZÜNET (10 perc)**

11:10 **Makrociklusos réz(II)-komplex katalizátorok immobilizálása szilika aerogélen – Mi befolyásolja a reaktivitást? (15+10 perc)**

Kalmár József, Fábán István, Lihi Norbert

ELKH-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debrecen

11:35 **Collective behavior of self-organized precipitate tubes (15+10 perc)**

Pawan Kumar^{1,2}, Qinpu Wang¹, Dezső Horváth³, Ágota Tóth² and Oliver Steinbock¹

¹ *Florida State University, Department of Chemistry and Biochemistry, Tallahassee, USA*

² *Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged*

³ *Department of Applied and Environmental Chemistry, University of Szeged*

12:00 **EBÉD (60 perc)**

Budapest, 2022. október 13.

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 „RKFBM őszi 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 Mátrafüredi Akadémiai Üdülő és Malom Fogadó

<http://www.udulo.mta.hu/uduloink/matrafuredi-akademiai-udulo-es-malom-fogado>

É 47°50'01,37" K 19° 58'09,53"

3232 Mátrafüred, Akadémia u. 1-3.

E-mail: matrafured@udulo.mta.hu

Telefon: 06 37 320 026

Autóval a következőképpen közelíthető meg: Gyöngyös belterületén a 24-es főúton kell haladni Mátrafüred felé. Mátrafüreden a település végének közelében bal kéz felé fák takarásában látható a környék legnagyobb épülete, az Avar szálló. Az Akadémiai Üdülő utcája éppen a hotellel szemben indul fölfelé, Gyöngyös felől érkezve a jobb oldalon. Az utcasarkon tábla is jelzi az üdülőt. A szokásos menetidő autóval Budapestről 60-70 perc, Debrecenből szűk két óra, Veszprémből és Szegedről két és fél óra, Pécsről három és fél óra.

Az üdülő megközelítése Budapestről tömegközlekedéssel Volán autóbusszal célszerű. A budapesti Stadion buszpályaudvarról 9:45-kor indul autóbusz Kékestetőre, erről átszállás nélkül, 11:10-kor a Mátrafüred, autóbusz-váróterem megállónál, az Akadémiai Üdülő közvetlen közelében lehet leszállni. Későbbi lehetőség a 11:45-kor Bükkszékre induló autóbusz, amely menetrend szerint 13.10-kor érkezik ugyanehhez a megállóhoz. Visszafelé számos busz van (pl. 12:44, 14.44, 15.59), a menetidő körülbelül másfél óra. A felsorolt járatok átszállás nélküliek. Vonatot nem célszerű választani, mert Gyöngyösön amúgy is a már említett két busz egyikére kellene átszállni.

Részletes Volánbusz menetrend

Budapest–Gyöngyös–Mátraháza–Mátraszentimre–Fallóskút (1044)

<https://www.volanbusz.hu/hu/menetrendek/vonal-lista/vonal/?menetrend=1044>

<https://www.volanbusz.hu/hu/menetrendek/vonal-lista/vonal/?menetrend=1044&dir=from>

Budapest–Gyöngyös–Mátraháza–Kékestető (1045)

<https://www.volanbusz.hu/hu/menetrendek/vonal-lista/vonal/?menetrend=1045>

<https://www.volanbusz.hu/hu/menetrendek/vonal-lista/vonal/?menetrend=1045&dir=from>

Budapest–Gyöngyös–Mátraháza–Recsk–Bükkszék (1046)

<https://www.volanbusz.hu/hu/menetrendek/vonal-lista/vonal/?menetrend=1046>

<https://www.volanbusz.hu/hu/menetrendek/vonal-lista/vonal/?menetrend=1046&dir=from>

JÁRATSZÁM:	1045	1046	1044	1045	1046	1045	1046	1044	1046
Budapest, Stadion aut. pu.	06:45	07:45	08:15	09:45	11:45	13:45	15:45	17:00	17:45
Mátrafüred, aut. vt.	08:10	09:10	09:40	11:10	13:10	15:10	17:10	18:25	19:10
Végállomás:	Kékes-tető	Bükk-szék	Fallóskút	Kékes-tető	Bükk-szék	Kékes-tető	Sirok	Mátraszentimre	Sirok

JÁRATSZÁM:	1046	1044	1046	1045	1045	1046	1044	1045	1046
Indulási állomás	Sirok	Mátraszentimre	Parád-fürdő	Kékes-tető	Kékes-tető	Bükk-szék	Fallóskút	Kékes-tető	Bükk-szék
Mátrafüred, aut. vt	06:29	6:59	08:44	10:44	12:44	14:44	15:59	16:44	18:44
Budapest, Stadion aut. pu.	08:05	8:35	10:15	12:15	14:15	16:15	17:30	18:15	20:15

JELENTKEZÉSI LAP

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága
2022. október 27-28-én a Mátrafüredi Akadémiai üdülőben tartandó ülésére.

Elektronikusan kitöltve beküldendő:

nagy.tibor@ttk.hu email címre

2022. október 17-e 12 óráig.

Név:

Intézmény:

AZ ÜLÉS KÖVETKEZŐ NAPJAIN TERVEZEK RÉSZT VENNI:

Online részvétel	[]
Jelenléti részvétel október 27-én délután	[]/[]
Jelenléti részvétel október 28-én délelőtt	[]

JELENLÉTI RÉSZVÉTEL ESETÉN SZÁLLÁS ÉS ELLÁTÁSI IGÉNYEK:

Nem kérek szállást és ellátást	0.Ft/fő	[]
Kétágyas szállás teljes ellátással IFÁ-val	26.240.Ft/fő	[]
Egyágyas szállás teljes ellátással IFÁ-val	31.240.Ft/fő	[]

RÉSZLEGES IGÉNY ESETÉN:

október 27-én ebéd (3 fogásos)	3.800.Ft/fő	[]
október 27-én vacsora (2 fogásos)	3.200.Ft/fő	[]
október 27-én kétágyas szállás + reggeli + IFA	15.440.Ft/fő/éj	[]
október 27-én egyágyas szállás + reggeli + IFA	20.440.Ft/fő/éj	[]
október 28-án ebéd (3 fogásos)	3.800.Ft/fő	[]

Vegetáriánus étkeztetést szeretnék kérni: []

A feltüntetett árak az ÁFÁ-t tartalmazzák.

Az elhelyezést az alábbi személyekkel kérem közös szobában (kölcsonös megjelölést kérnék):

.....

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

.....

Számlázási adatok:

Név:

Cím:

Adószám (nem saját névre kért számla esetén):

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

Előreutalással szeretnék fizetni: []

Kérés a számlázással kapcsolatban:

....., 2022. október nap

.....

aláírás