



## REAKCIÓKINETIKAI ÉS FOTOKÉMIAI MUNKABIZOTTSÁG

## KOORDINÁCIÓS KÉMIAI MUNKABIZOTTSÁG

*Munkabizottsági ülés: 2018. november 8-9., Veszprém*

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

A Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság és a VEAB Kémiai Szakbizottság közös tudományos ülését 2018. november 8-9-én tartja Veszprémben, melyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés az MTA Veszprémi Területi Bizottságának székházában (8200, Veszprém, Vár utca 37.) kerül megrendezésre az alábbi programponatok szerint. **A rendezvényen a részvétel ingyenes.**

### **November 8., csütörtök**

#### **10:00 Megnyitó (5 perc)**

Lente Gábor, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság elnöke

#### 10:05 **Arany nanorészecskék előállítása liposzómákban (15+5 perc)**

Medveczky Zsófia<sup>1</sup>, Lagzi István<sup>1,2</sup>, Holló Gábor<sup>2</sup>, Ylenia Miele<sup>3</sup>, Federico Rossi<sup>3</sup>

<sup>1</sup> BME Fizika Tanszék

<sup>2</sup> MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport

<sup>3</sup> University of Salerno, Olaszország

#### 10:25 **Halogénatom + etán reakciók potenciálisenergia-felületeinek nagy pontosságú ab initio feltérképezése (15+5 perc)**

Papp Dóra, Gruber Balázs és Czakó Gábor

*Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport*

#### 10:45 **Fémrácsok duzzadása és regenerációja ion sugárzás hatására, kontakt potenciál változások kinetikája (15+5 perc)**

Horváth Ákos, Nagy Norbert, Vértesy Gábor, Schiller Róbert

*MTA Energiatudományi Kutatóközpont*

#### **11:05 Szünet (10 perc)**

#### 11:15 **Redukált-dimenziós reakciódinamikai modellek klasszikus mechanikai alkalmazásának problémái (15+5 perc)**

Nagy Tibor, Vikár Anna, Lendvai György

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

#### 11:35 **Gyűrűs éterek és észterek környezeti kémiája: reakciókinetikai és fotokémiai kutatások - PhD értekezés alapjául szolgáló eredmények előzetes bemutatása (30+10 perc)**

Illés Ádám (témavezető: Dóbé Sándor)

*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

#### **12:15 Szünet (1 óra 25 perc)**

#### 13:40 **A peroxidationok vizes oldatbeli egyensúlyai és stabilitása (15+5 perc)**

Valkai László<sup>1,2</sup>, Peintler Gábor<sup>3</sup>, Marton Antal<sup>1</sup>, Yelena Koshman<sup>1</sup>, Horváth Attila<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Pécsi Tudományegyetem, Szervetlen Kémia Tanszék

<sup>2</sup> Pécsi Tudományegyetem, Szentágotthai János Kutatóközpont

<sup>3</sup> Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

#### 14:00 **Az X<sup>-</sup> + CH<sub>3</sub>Y [X = OH, SH, CN, PH<sub>2</sub>, NH<sub>2</sub>; Y = F, Cl, Br, I] S<sub>N</sub>2 reakciók inverziós és retenciós reakcióútjainak nagy pontosságú ab initio feltérképezése (15+5 perc)**

Tasi Domonkos Attila, Fábíán Zita és Czakó Gábor

*Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport*

- 14:20 **Liposzómák pH indukált osztódása (15+5 perc)**  
Lagzi István<sup>1,2</sup>, Medveczky Zsófia<sup>1</sup>, Holló Gábor<sup>2</sup>, Ylenia Miele<sup>3</sup>, Federico Rossi<sup>3</sup>  
<sup>1</sup> BME Fizika Tanszék  
<sup>2</sup> MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport  
<sup>3</sup> University of Salerno, Olaszország

**14:40 Szünet (10 perc)**

- 14:50 **Rezgési és forgási állapotösszegek szerepe mélyhűtött nagy szénmolekulák laboratóriumi és kozmikus infravörös gázfázisú spektroszkópiájában (15+5 perc)**  
Nemes László<sup>1</sup>, Nagy Tibor<sup>1</sup>, Marcel Drabbels<sup>2</sup>  
<sup>1</sup> MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet  
<sup>2</sup> École polytechnique fédérale de Lausanne, Svájc
- 15:10 **Infravörös spektrumokban megfigyelhető izotópeltolódások értelmezése tömeg-korrelációs diagramok segítségével (15+5 perc)**  
Szántó Judit Katalin, Lendvay György  
MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet
- 15:30 **Tömegeffektusok a  $\text{CH}_3 + \text{HBr} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{Br}$  reakcióban (15+5 perc)**  
Csorba Benjámín<sup>1</sup>, Szabó Péter<sup>2</sup>, Lendvay György<sup>1</sup>  
<sup>1</sup> MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet  
<sup>2</sup> University of Luleå, Svédország

**15:50 Szünet (10 perc)**

- 16:00 **Egy göcképződés-növekedés típusú nanorészecske-növekedési modell sebességi egyenletének analitikus megoldása (15+5 perc)**  
Szabó Rebeka<sup>1</sup>, Lente Gábor<sup>2</sup>  
<sup>1</sup> Debreceni Egyetem  
<sup>2</sup> Pécsi Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék
- 16:20 **A  $\text{F}^- + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$  reakció komplex potenciálisenergia-felületének nagy pontosságú ab initio feltérképezése (15+5 perc)**  
Tajti Viktor, Czakó Gábor  
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 16:40 **Királis N,S ligandumok: szintézis, koordinációs kémia és katalitikus tulajdonságok (15+5 perc)**  
Major Máté Miklós, Bényei Attila, Lendvay György, Bakos József, Farkas Gergely  
Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

**17:00 Szünet (10 perc)**

- 17:10 **Potenciálisenergia-felületek fejlesztésének automatizálása (15+5 perc)**  
Győri Tibor, Czakó Gábor  
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 17:30 **Lantanoida(III)-porfirin komplexek képződésének és fotoindukált tulajdonságainak vizsgálata (15+5 perc)**  
Valicsek Zsolt, Kiss Melitta Patrícia, Muhammad Imran, Horváth Ottó  
Pannon Egyetem, Általános és Szerves Kémia Intézeti Tanszék
- 17:50 **A  $\text{F}^- + \text{CH}_3\text{I}$  reakció dinamikájának és mikroszolvatációjának elméleti vizsgálata (15+5 perc)**  
Olasz Balázs, Czakó Gábor  
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

**18:10 Szünet (1 óra 50 perc)**

- 20:00 **Beszámoló kínai útjaimról – szórakoztató előadás (< 1 óra)**  
Bányai István  
Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

**November 9., péntek**

**10:00 Megnyitó (5 perc)**

**Kaizer József, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság és  
a VEAB Kémiai Szakbizottság elnöke**

**10:05 Háromfogú királis P,N,N és P,N,O ligandumok koordinációs és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata (15+5 perc)**

Császár Zsófia, Bényei Attila, Lendvay György, Bakos József, Farkas Gergely  
*Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék*

**10:25 A perszulfidáció és a tioredoxin rendszer együttműködése funkcionális ciszteinek védelmében irreverzibilis oxidáció ellen (15+5 perc)**

Dóka Éva<sup>1</sup>, Yumi Abiko<sup>2</sup>, Markus Dagnell<sup>3</sup>, Tomoaki Ida<sup>4</sup>, Noémi Balog<sup>1</sup>, Belen Espinosa<sup>3</sup>, Nho Luong Cong<sup>2</sup>, Akira Nishimura<sup>4</sup>, Elias Arnér<sup>3</sup>, Ed Schmidt<sup>5</sup>, Yoshito Kumagai<sup>2</sup>, Takaaki Akaike<sup>4</sup>, Nagy Péter<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológia és Toxikológia Osztály

<sup>2</sup> Environmental Biology Section, Faculty of Medicine, University of Tsukuba, Tsukuba, Japán

<sup>3</sup> Department of Medical Biochemistry and Biophysics, Division of Biochemistry, Karolinska Institutet, Stockholm, Svédország

<sup>4</sup> Department of Environmental Health Sciences and Molecular Toxicology, Tohoku University Graduate School of Medicine, Sendai, Japán

<sup>5</sup> Department of Microbiology and Immunology, Montana State University, Montana, USA

**10:45 Nem-hém vastartalmú flavon szintáz modellek vizsgálata (15+5 perc)**

Kripli Balázs, Speier Gábor, Kaizer József  
*Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék*

**11:05 Szünet (10 perc)**

**11:15 Karboximetil-polietilénimin paramágneses fémionokkal alkotott komplexeinek szerkezete és dinamikája (15+5 perc)**

Miklósi Tamás, Kiss Virág, Novák Levente, Bányai István  
*Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

**11:35 Nitrozoperszulfid: egy újabban azonosított szulfán kén donor molekula, elnyújtott és széles körű fehérje per- és polisulfidációs hatással (15+5 perc)**

Bogdándi Virág<sup>1</sup>, Batai István Zoárd<sup>2</sup>, Magda Minnion<sup>3</sup>, Sándor Zoltán<sup>2</sup>, Pintér Erika<sup>2</sup>, Martin Feelisch<sup>3</sup>, Nagy Péter<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológia és Toxikológia Osztály

<sup>2</sup> Pécsi Tudományegyetem, Általános Orvostudományi Kar, Farmakológiai és Farmakoterápiás Intézet

<sup>3</sup> Clinical and Experimental Sciences, Faculty of Medicine, and University Hospital Southampton NHS Foundation Trust, Egyesült Királyság

**11:55 Várhatóan hipoxia-aktivált fluoreszcens Co(III)-komplexek szintézise és vizsgálata (15+5 perc)**

Ozsváth András, Kapitány Réka, Buglyó Péter  
*Debreceni Egyetem, Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék*

**12:15 Szünet (1 óra 25 perc)**

**13:40 Triaza és tetraaza aminopolikarboxilát ligandumok ritkaföldfém(III) és gallium(III) komplexei, mint biztonságos teragnosztikai készítmények az orvosi képalkotásban: kinetika, egyensúly és szerkezet - MTA dolgozat előzetes bemutatója (45+15 perc)**

Baranyai Zsolt<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Bracco Imaging S.p.A, Olaszország

<sup>2</sup> Debreceni Egyetem, Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

**14:40 Szünet (10 perc)**

14:50 **Hisztidint és/vagy metionint tartalmazó peptidek oxidációját befolyásoló tényezők vizsgálata (15+5 perc)**

Kállay Csilla<sup>1</sup>, Bodnár Nikolett<sup>2</sup>, Csire Gizella<sup>2</sup>, Nagy Lajos<sup>3</sup>, Bellér Gábor<sup>2</sup>

<sup>1</sup> MTA-DE Redoxi- és Homogén Katalitikus Reakciók Mechanizmus Kutatócsoport

<sup>2</sup> Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

<sup>3</sup> Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

15:10 **Hidrogén-szulfid koncentrációjának meghatározása vérmintákból (15+5 perc)**

Ditrói Tamás, Nagy Attila, Nagy Péter

Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológia és Toxikológia Osztály

15:30 **Szabályozott fehérjealapú mesterséges enzimek fejlesztése (15+5 perc)**

Gyurcsik Béla, Hajdu Bálint, Heba A.H. Abd Elhameed, Balogh Ria Katalin, Hermann Enikő, Németh Eszter

Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

**15:50 Szünet (10 perc)**

16:00 **Szenzorként alkalmazható ferrocén tartalmú karbamidszármazékok vizsgálata (15+5 perc)**

Keszei Soma, Balogh Szabolcs, Nagy Livia, Skodáné Földes Rita, Lendvay György

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

16:20 **Transzszulfurációs utak átprogramozásának jelentősége tumorprogresszióban (15+5 perc)**

Erdélyi Katalin, Nagy Péter

Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológia és Toxikológia Osztály

16:40 **Enantioselective C-H bond oxidation and epoxidation reactions by chiral tetrapyrrolyl oxoiron(IV) complex (15+5 perc)**

Bashdar I. Meena, Balázs Kripli, Gábor Speier, József Kaizer

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

**17:00 Elnöki zárszó**

**Lente Gábor és Kaizer József**

Tisztelettel,

*Dr. Lente Gábor*, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság elnöke

*Dr. Kaizer József*, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság és  
a VEAB Kémiai Szakbizottság elnöke

*Dr. Nagy Tibor*, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság titkára

*Dr. Enyedy Éva Anna*, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság titkára

*Dr. Valiskó Mónika*, a VEAB Kémiai Szakbizottság titkára

## JELENTKEZÉSI LAP

A Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság és a VEAB  
Kémiai Szakbizottság közös tudományos ülésére (Veszprém, 2018. november 8-9-én).  
(válasz e-mailben: [nagy.tibor@ttk.mta.hu](mailto:nagy.tibor@ttk.mta.hu) címre)

Név: .....

Intézmény : .....

Az ülés következő napjain kívánok részt venni:

November 8., csütörtök

November 9., péntek

....., 2018. .... hó ..... nap

.....  
aláírás

## **Rendezvény helyszíne:**

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA, VESZPRÉMI TERÜLETI BIZOTTSÁGÁNAK (VEAB) a székháza: 8200 Veszprém, Vár utca 37.

## **Szállások és étkezési lehetőségek google térképen:**

<https://www.google.com/maps/d/viewer?mid=1cZHnoCTRq2P8LXUgK45Wx82KN-Z-6xcW&ll=47.09136308368051%2C17.90513460000011&z=15>

## **Szállások**

### **MTA VEAB székház**

- Cím: 8200 Veszprém, Vár utca 37.
- Tel: +36 88 428 859; +36 88 426 100
- E-mail: [veab@tab.mta.hu](mailto:veab@tab.mta.hu)
- Web: <https://tab.mta.hu/veszpremi-teruleti-bizottsag/szobafoglalas/>

### **Éllő Panzió**

- Cím: Veszprém, József Attila u. 25, 8200
- Tel: +36 88 420 097
- E-mail: [info@ellopanzio.hu](mailto:info@ellopanzio.hu)
- Web: <http://www.ellopanzio.hu/>

### **Hotel Magister Youth Hostel**

- Cím: H-8200 Veszprém, József Attila u. 34/ 2.
- Tel: +36/88 623 000
- Fax: +36/88 623 009
- E-mail: [info@hotelmagister.hu](mailto:info@hotelmagister.hu)
- Web: [www.hotelmagister.hu](http://www.hotelmagister.hu)

### **Pannon Egyetem Központi Kollégium**

- Cím: 8200 Veszprém, Egyetem u. 12.
- Tel: 06/88/800-000
- E-mail: [recepicio@vekoll.uni-pannon.hu](mailto:recepicio@vekoll.uni-pannon.hu)
- Web: <https://kollegiumok.uni-pannon.hu/kollegiumok/veszprem/kozponti-kollegium>

### **Péter Pál Panzió**

- Cím: 8200 Veszprém, Dózsa György út 3.
- Tel: 88/328-091, +36204277161
- E-mail: [info@peterpal.hu](mailto:info@peterpal.hu)
- Web: <http://www.peterpal.hu/>

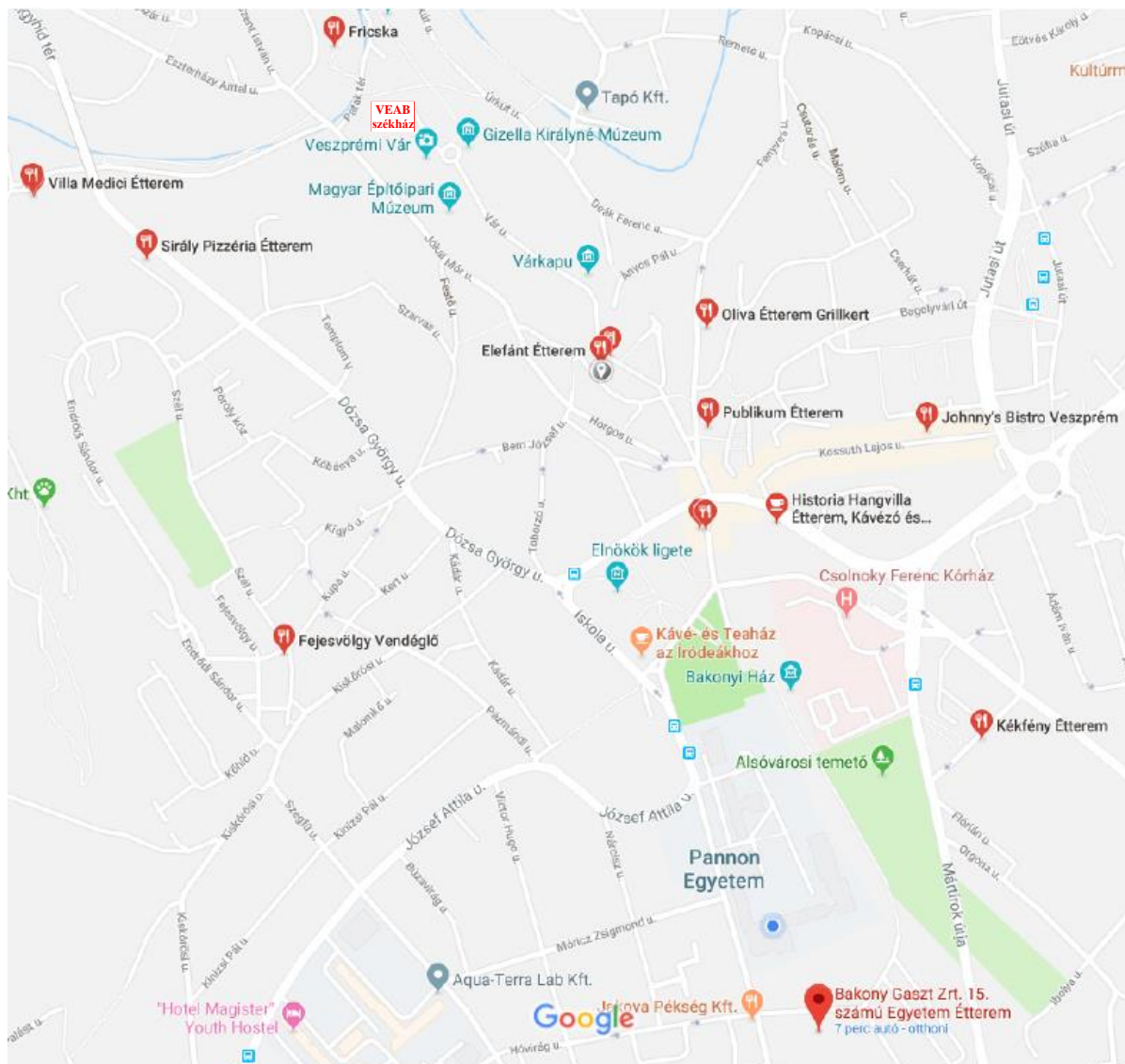
### **Gizella Hotel és Étterem**

- Cím: 8200 Veszprém, Jókai M. u. 48.
- Tel: +36 88 / 579 - 490
- E-mail: [info@hotelgizella.hu](mailto:info@hotelgizella.hu)
- Web: <http://hotelgizella.hu/hu/hotel-veszprem/>

### **Oliva Hotel és Étterem**

- Cím: 8200 Veszprém, Buhim u. 14-16.
- Tel: +36 88 403 875
- E-mail: [oliva@oliva.hu](mailto:oliva@oliva.hu)
- Web: <http://www.oliva.hu>

## **Étkezési lehetőségek**



### **Fricska**

Veszprém, Miklós u. 10, 8200  
(88) 794 331

### **Elefánt Étterem**

Veszprém, Óváros tér 6, 8200  
(88) 329 695

### **Castle Home Bistro**

Veszprém, Óváros tér 4, 8200  
(88) 444 445

### **Publikum Étterem**

Veszprém, Szabadság tér 12, 8200  
(88) 794 067

### **Oliva Étterem Grillkert**

Veszprém, Buhim u. 14-16, 8200  
(88) 561 900

### **Cserhát Kft.**

Veszprém, Kossuth Lajos u. 6, 8200  
(88) 425 441

### **Németh Lajosné - Hungária Étterem**

Veszprém, Megyeház tér 2, 8200  
hungariaetterem.hu  
(88) 578 850

### **GUSTO13 Bistro & Delicate**

Veszprém, Csermák Antal u. 13, 8200  
gusto13.hu  
(88) 410 385

### **Bakony Gaszt Zrt. 15. számú Egyetem Étterem**

Veszprém, 8200

## Átszállás nélküli busz- és vonatjáratok

Budapest - Veszprém, november 8-9.

Közlekedési eszköz	indulás		menetidő	érkezés	
	helye	ideje		helye	ideje
vonat	Budapest Déli pályaudvar	06:30	1:26	Veszprém vasútállomás	07:56
		07:30	1:25		08:55
		08:30	1:26		09:56
		09:30	1:25		10:55
busz	Budapest Népliget autóbusz-pályaudvar	06:45	1:45	Veszprém autóbusz-állomás	08:30
		07:15	2:10		09:25
		08:15	2:05		10:20
		08:45	2:15		11:00

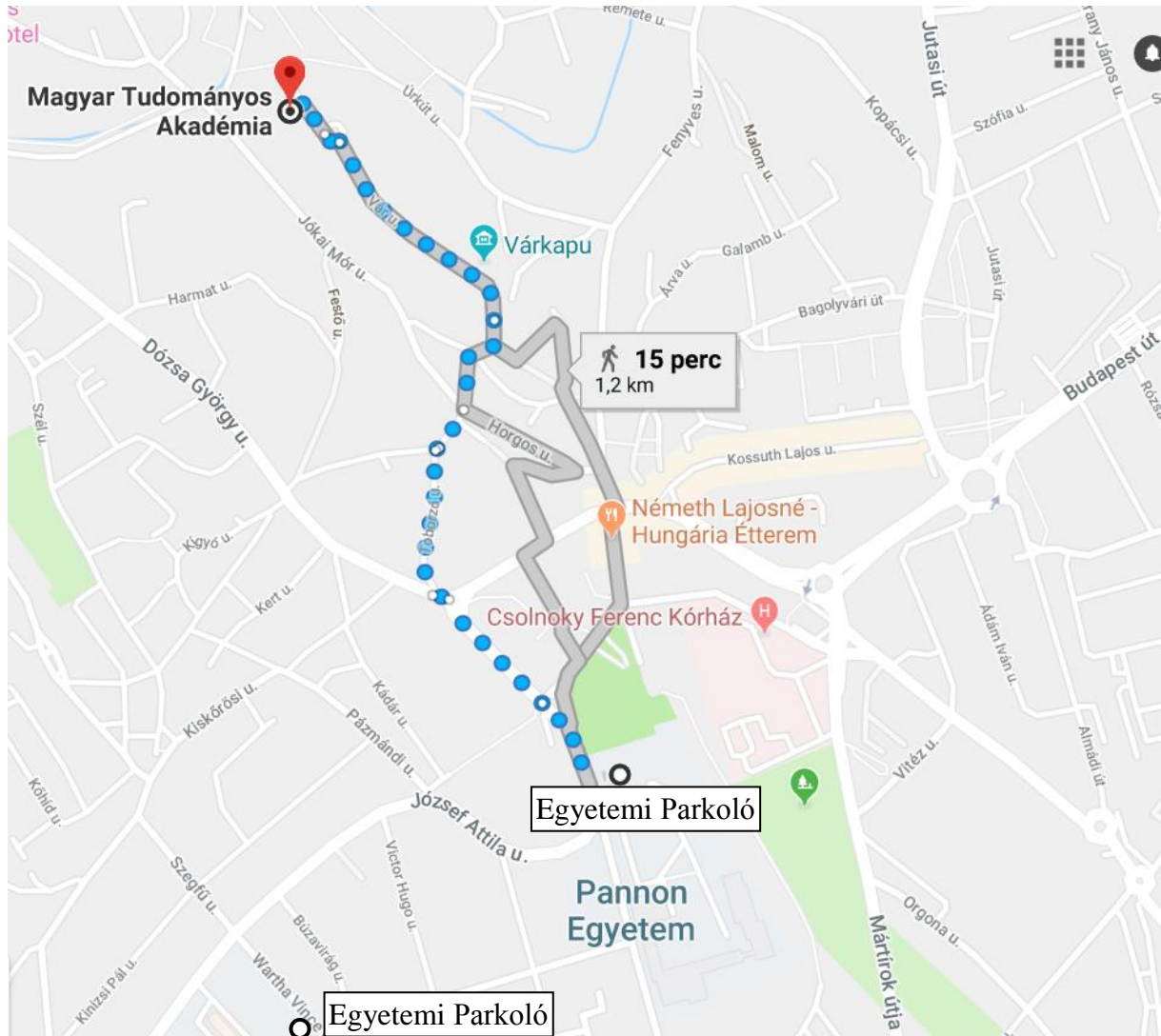
Veszprém - Budapest, november 8-9.

Közlekedési eszköz	indulás		menetidő	érkezés	
	helye	ideje		helye	ideje
vonat	Veszprém vasútállomás	14:02	1:27	Budapest Déli pályaudvar	15:29
		15:02	1:27		16:29
		16:02	1:27		17:29
		17:02	1:27		18:29
		18:02	1:27		19:29
		19:02	1:27		20:29
		20:02	1:27		21:29
busz	Veszprém autóbusz-állomás	14:15	2:15	Budapest Népliget autóbusz-pályaudvar	16:30
		15:00	2:10		17:10
		15:45	2:15		18:00
		16:10	2:00		18:10
		16:30	2:15		18:45
		16:40	2:15		18:55
		17:15	1:45		19:00
		17:45	2:10		19:55
		18:30	2:10		20:40
		19:15	2:00		21:15
19:55	2:20	22:15			

A vasútállomás Veszprém külkerületében van: a VEAB székháztól 3.6 km-re és kb. 50 perc sétára, ezért gyalog nem érdemes nekivágni. Szerencsére nagy sűrűséggel járnak helyi és áthaladó távolsági buszok az autóbusz-állomás felé (és vissza) 4 perc menetidővel, ahonnan a VEAB székház már csak 1.5 km-re van és kb. 20 perc sétával elérhető.

## Parkolási lehetőségek

1. **Pannon Egyetem parkolójában** lehetőség van ingyenes parkolásra: Egyetem u. 10. és Wartha Vince u. 1. (21 perc séta) címeiken. A sorompónál a rendezvény nevét kell mondani.



**2. Veszprém belvárosában a vár körül** számos ingyenes parkolási lehetőség van **a környező utcákban**. Azonban a várba a Vár utca és az Úrkút utcából nyíló lépcső (lásd később) kivételével más gyalogút nem vezet fel, ezért senkit se tévesszen meg a környező utcák közelsége a parkolási hely kiválasztásakor!

Részletes utca térkép a komplementer, fizetős parkolási zónákról itt található:

<http://parkall.hu/zone.html?city=veszprem>

Részletekért kattintson a kívánt zónára.

További információk " Városok " menüpont alatt



**Zóna információk:**

90,-Ft/óra , Sárga zóna

180,-Ft/óra , Zöld zóna

240,-Ft/óra , Piros zóna

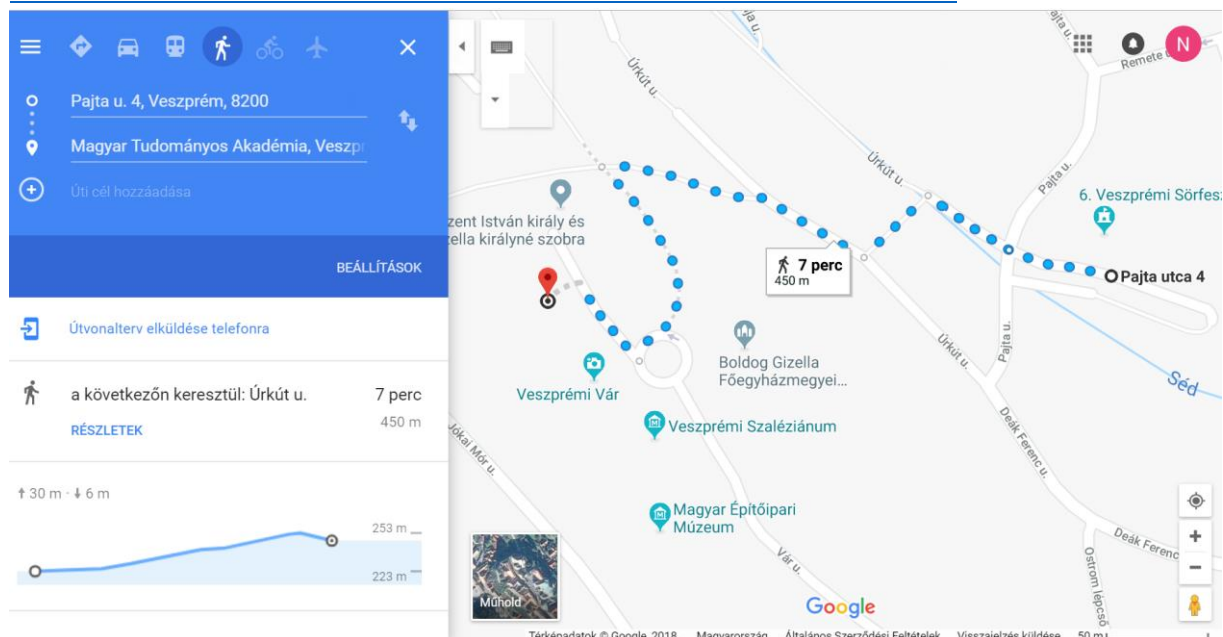
Infinitly hirdetés

3. Található a közelben egy **ingyenes parkoló is a Pajta utcában**:

<https://www.idegenvezetok-veszprem.org/parkolas-veszpremben.html>

„Vár alatti parkoló a Pajta utcában - innen rövid idő alatt elérhetőek a Veszprémi Vár látnivalói. Az Úrkút utcából nyíló meredek lépcsőn először a Benedek-hegyre, majd onnan további lépcsőkön közvetlenül a székesegyháznál érünk fel a várba.”

<https://www.google.hu/maps/dir/47.0972486,17.9060563/Veszpr%C3%A9m,+Magyar+Tudom%C3%A1nyos+Akad%C3%A9mia,+V%C3%A1r+u.+37,+8200/@47.0970213,17.9027823,17.54z/data=!4m9!4m8!1m0!1m5!1m1!1s0x47699a5c4b5c4601:0xa6ca1d0252aee2dc12m2!1d17.9023599!2d47.0971385!3e2>



Innen 450 m, illetve ~7 perc séta (**30 méter szintemelkedéssel**) a VEAB székház.

