



MEGHÍVÓ

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága soron következő ülését 2019. november 7-8-án Mátrafüreden tartja, amelyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés a Mátrafüredi Akadémiai Üdülőben (3232 Mátrafüred, Akadémia utca 1-3.) kerül megrendezésre az alábbi programpontok szerint. További információk a helyszínről és a szállásról, illetve az utazással kapcsolatban a program után találhatóak. **Az ülésen való részvételre 2019. október 30-a 20 óráig lehet jelentkezni** az utolsó oldalon található jelentkezési lappal, amelyet kitöltve a nagy.tibor@ttk.mta.hu e-mail címre kell beküldeni. Az esetleges kérdéseket, lemondásokat, módosításokat szintén erre a címre kell megírni a lehető leghamarabb.

PROGRAM

November 7., csütörtök

10:00 **Megnyitó (5 perc)**

Lente Gábor, elnök

Pécsi Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

10:05 **A szinglet oxigén dimer emissziójának elméleti vizsgálata (20+10 perc)**

Tajti Attila¹, Lendvay György², Szalay Péter¹

¹ *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémia Intézet, Budapest*

² *Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*

10:35 **Hatékony kvantumkémiai módszerek nagy molekulák gerjesztett állapotainak számításához (20+10 perc)**

Mester Dávid, Nagy Péter, Kállay Mihály

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

11:05 **SZÜNET (10 perc)**

11:15 **Nemadiabatikus átmenetek kémiai reakciókban (20+10 perc)**

Lendvay György

Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest

11:45 **Időfelbontott mérések modellezése dinamikai szimulációkkal gerjesztett elektronállapotokban (20+10 perc)**

Rozgonyi Tamás^{1,2}, Pápai Mátyás³, Philipp Marquetand⁴, Thomas Penfold⁵, Vankó György¹, Thomas Weinacht⁶

¹ *Wigner Fizikai Kutatóközpont, Részecske- és Magfizikai Intézet, Budapest*

² *Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*

³ *Department of Chemistry, Technical University of Denmark, Kongens Lyngby, Denmark*

⁴ *Department of Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, University of Vienna, Austria*

⁵ *Chemistry - School of Natural and Environmental Sciences, Newcastle University, United Kingdom*

⁶ *Department of Physics and Astronomy, Stony Brook University, Stony Brook, New York, USA*

12:15 **EBÉDSZÜNET (2 óra 15 perc)**

- 14:30 **Fémionokkal előidézett hatóanyag felszabadulás kukurbit[7]uril makrociklusból (20+10 perc)**
Miskolczi Zsombor, Megyesi Mónika, Biczók László
Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest
- 15:00 **Rezonancia és lebegés gerjesztett kémiai oszcilláló rendszerekben (30+10 perc)**
 Hugh Shearer Lawson¹, Holló Gábor², Horváth Róbert³, Lagzi István^{1,2}
¹ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék*
² *MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport, Budapest*
³ *Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet, Budapest*
- 15:40 **SZÜNET (10 perc)**
- 15:50 **Egyirányúan csatolt metilvörös oszcillátor (15+5 perc)**
Német Norbert¹, Holló Gábor², Lagzi István^{1,2}
¹ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék*
² *MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport, Budapest*
- 16:10 **Reakció-diffúzió mintázatok folyadékcsatornás nyitott reaktorban (20+10 perc)**
Dúzs Brigitta és Szalai István
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Nemlineáris Kémiai Dinamika Laboratórium, Budapest
- 16:40 **A OH⁻ + CH₃I reakció potenciálisenergia-felületének fejlesztése és dinamikája különböző kvantumkémiai szinteken (15+5 perc)**
Tasi Domonkos Attila és Czakó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE „Lendület” Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 17:00 **SZÜNET (10 perc)**
- 17:10 **Egyetemek összehasonlítása. Mire tanít minket a leydeni rangsor? (20+5 perc)**
 Abonyi János¹ és Héberger Károly²
¹ *Pannon Egyetem, MTA-PE „Lendület” Komplex Rendszerek Figyelemmel Kísérése Kutatócsoport, Veszprém*
² *Természettudományi Kutatóközpont, AKI Plazmakémiai Kutatócsoport, Budapest*
- 17:35 **Érdi Péter új könyve: Ranking (10+5 perc)**
 Lente Gábor
Pécsi Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék
- 17:50 **Hogyan hangoljuk össze a bort, a palackot és a világítást? (20+5 perc)**
 Keszei Ernő
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Budapest
- 18:15 **VACSORA (1 óra 15 perc)**
- 19:30 **Úrrakéták hajtóanyagainak reakciókinetikája (esti szórakoztató előadás)**
 Turányi Tamás
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Reakciókinetikai Laboratórium, Budapest

November 8., péntek

- 8:00 **REGGELI (1 óra)**
- 9:00 **Determining the Rate Coefficient of a Gas-Phase Elementary Reaction over Extended Pressure and Temperature Ranges (20+10 perc)**
Timo T. Pekkanen¹, Satya P. Joshi¹, György Lendvay², Raimo S. Timonen¹, Arkke J. Eskola¹
¹ *Department of Chemistry, University of Helsinki, Finland*
² *Institute of Materials and Environmental Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, Budapest, Hungary*

- 9:30 **Csapadékképződés modellezése mikrofluidikás reaktorban (10+5 perc)**
Papp Paszkál, Tóth Ágota, Horváth Dezső
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
- 9:45 **Áramlásvezérelt csapadékképződés vékony folyadék rétegben (10+5 perc)**
Balog Edina és Schuszter Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
- 10:00 **SZÜNET (10 perc)**
- 10:10 **Elméleti reakciódinamika kutatások a Szegedi Tudományegyetemen (30+10 perc)**
Czakó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE „Lendület” Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 10:50 **Számítási eredmények és kísérleti valóság alkének ozmium-tetroxidos oxidációjában (10+10 perc)**
Lente Gábor
Pécsi Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék
- 11:10 **SZÜNET (10 perc)**
- 11:20 **Reaktivitás szimulációja a nano méretskálán (20+10 perc)**
Höltzl Tibor
*Furukawa Electric Technológiai Intézet, Budapest
MTA-BME Számítógépezérelt Kémia Kutatócsoport,
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*
- 11:50 **Radiálisan terjedő kémiai frontok dinamikája (20+10 perc)**
Tóth Ágota¹, Schuszter Gábor¹, Nirmali P. Das¹, Lantos Emese¹, Horváth Dezső², Ann De Wit³, Fabian Brau³
¹ *Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék*
² *Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék*
³ *Université libre de Bruxelles (ULB), Brüsszel, Belgium*
- 12:20 **EBÉD**

Budapest, 2019. október 29.

Tisztelettel,

Lente Gábor, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság elnöke

Nagy Tibor, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság titkára

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", amely 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 címe: 3232 Mátrafüred, Akadémia u. 1-3., Telefon: 06-37-320-026.

Az üdülő megközelítése Budapestről tömegközlekedéssel Volán autóbusszal célszerű. A budapesti Stadion buszpályaudvarról 7.45-kor indul autóbusz Bükkszékre, erről átszállás nélkül, 9.10-kor a Mátrafüred, autóbusz-váróterem megállónál, az Mátrafüredi Akadémiai Üdülő közvetlen közelében lehet leszállni. Későbbi lehetőség a 8.15-kor Mátraszentimrére induló autóbusz, amely menetrend szerint 9.40-kor érkezik ugyanehhez a megállóhoz. Visszafelé számos busz van (pl. 13.00, 15.45, 16.00, 17.00), a menetidő 1 óra 25 perc. A felsorolt járatok átszállás nélküliek. Vonatot nem célszerű választani, mert Gyöngyösön amúgy is a már említett két busz egyikére kellene átszállni.

Az ülésen való részvételre kérem legkésőbb **2019. október 30-a este 8 óráig** jelentkezzenek Nagy Tibornál e-mailen (nagy.tibor@ttk.mta.hu) a következő oldalon található jelentkezési lap kitöltésével és elküldésével. Az esetleges lemondásokat, módosításokat kérem jelentsék be azonnal ugyanott.

JELENTKEZÉSI LAP

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága
2019. november 7-8-án a Mátrafüredi Akadémiai üdülőben tartandó ülésére.

**Elektronikusan kitöltve beküldendő:
nagy.tibor@ttk.mta.hu email címre
2019. október 30-a 20 óráig.**

Név:

Intézmény:

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

Résztétel november 7-én délelőtt/délután /

Résztétel november 8-án délelőtt

A következő szolgáltatásokat kívánom igénybe venni:

Nem kérek semmilyen ellátást. 0 Ft/fő

Teljes ellátás és szállás igénylése esetén „konferencia részvételi díj”-ként adható számla:

Teljes ellátás egyágyas elhelyezéssel (27% ÁFA-val) 15.545 Ft/fő

Teljes ellátás 2/3-ágyas elhelyezéssel (27% ÁFA-val) 13.975 Ft/fő

(nov 7.: ebéd, vacsora, szállás, nov.8: reggeli, ebéd)

Részellátás igénylése esetén csak tételes számla adható, de a számlát tudják bontani:

november 7-én ebéd (3 fogásos) (5% ÁFA-val) 2.500 Ft/fő

november 7-én vacsora (2 fogásos) (5% ÁFA-val) 2.100 Ft/fő

november 7-én szállás kétágyas (18% ÁFA-val) 5.900 Ft/fő

november 7-én szállás egyágyas (18% ÁFA-val) 7.500 Ft/fő

november 8-án reggeli (svédasztalos) (5% ÁFA-val) 1.550 Ft/fő

november 8-én ebéd (3 fogásos) (5% ÁFA-val) 2.500 Ft/fő

További szállás és ellátás igények:

Speciális étkeztetést szeretnék kérni:

diabetikus **gluténmentes** **laktózmentes** **vegetáriánus**

Az árak a feltüntetett ÁFA-t tartalmazzák. ÁFA-t nem kell fizetnünk, mivel közfeladatot látunk el. Készpénzes, kártyás és előreutalásos (a kötelezettségvállalótól írásos megrendelést küldve) fizetési módokra van lehetőség.

Elhelyezés egy-, két- és háromágyas szobákban történik. Külön szoba igénylésére előreláthatólag korlátozottan, a jelentkezők számának függvényében lesz lehetőség.

Az elhelyezést az alábbi személyekkel kérem közös szobában:

....., 2019. hó nap

.....
aláírás