



MEGHÍVÓ

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága soron következő ülését 2021. május 27-én, csütörtökön webinarium formában tartja, amelyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülést Zoom szolgáltatás segítségével rendezzük meg az alábbi programpontok szerint. Az ülésen való részvételhez a munkabizottság levelezőlistáján szereplőknek nem kell regisztrálniuk. **Más érdeklődőktől azt szeretnénk kérni, hogy a nevüket és az intézetük nevét előzetesen küldjék el a nagy.tibor@ttk.hu címre.** A csatlakozáshoz szükséges információk a meghívó végén találhatóak.

PROGRAM

- 10:00 **Megnyitó (10 perc)**
Tóth Ágota, elnök
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
- 10:10 **Urea-ureáz reakció: autokatalízis, bistabilitás, reakciófrontok es oszcilláció (20+5 perc)**
Bánsági Tamás¹ és Taylor Annette F.²
¹ *School of Chemistry, University of Birmingham, Egyesült Királyság*
² *Department of Chemical and Biological Engineering, University of Sheffield, Egyesült Királyság*
- 10:35 **A csapadékreakciók kinetikáját jellemző fenomenológiai egyenlet és a reakciómechanizmus kapcsolata (15+5 perc)**
Das Prabha Nirmali¹, Zahorán Réka¹, Janovák László¹, Deák Ágota¹, Tóth Ágota¹, Horváth Dezső² és Schuszter Gábor¹
¹ *Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék*
² *Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék*
- 10:55 **SZÜNET (15 perc)**
- 11:10 **Fémorganikus térhálóok és arany nanorészecskék szintézise fenntartott nemegyensúlyi körülmények között (10+5 perc)**
Dúzs Brigitta¹, Holló Gábor², Schuszter Gábor³, Horváth Dezső⁴, Tóth Ágota³, Szalai István¹, Lagzi István^{2,5}
¹ *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Nemlineáris Kémiai Dinamika Laboratórium*
² *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport*
³ *Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék*
⁴ *Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék*
⁵ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék*
- 11:25 **Minimal Spline Fit: egy modell-független módszer mérési adatsorok statisztikus zajának meghatározása (10+5 perc)**
Nagy Tibor¹ és Turányi Tamás²
¹ *Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*
² *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémia Intézet, Budapest*
- 11:40 **Comparison of methane combustion mechanisms based on shock tube and rapid compression machine ignition delay time measurements (15+5 perc)**
Peng Zhang¹, István Gy. Zsély¹, Viktor Samu¹, Tibor Nagy² és Tamás Turányi¹
¹ *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémia Intézet, Budapest*
² *Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*
- 12:00 **EBÉDSZÜNET (2 óra 30 perc)**
- 14:30 **Szuperoxid-dizmutáz vizsgálatok NiSOD enzimmodellekben (20+5 perc)**
Bonczidai-Kelemen Dóra¹, May Nóra Veronika², Fábíán István¹ és Lih Norbert¹
¹ *Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék*
² *Természettudományi Kutatóközpont, Műszercentrum, Budapest*

- 14:55 **Ab initio számítások a metanol + hidroxilgyök rendszerre és praktikák a Hartree-Fock konvergenciaproblémák ellen (10+5 perc)**
Győri Tibor és Czakó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 15:10 **Fémek alacsony hőmérsékletű fajhője és standard elektród potenciálja (10+5 perc)**
Schiller Róbert és Horváth Ákos
Energiatudományi Kutatóközpont, Budapest
- 15:25 **SZÜNET (15 perc)**
- 15:40 **A hipoklórossav reakciója N-metil szubsztituált aminosavakkal (10+5 perc)**
Simon Fruzsina, Szabó Mária és Fábián István
Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
- 15:55 **Hangolendő paraméterek hatékony kiválasztása kinetikai modellek optimalizációjához (15+5 perc)**
Kovács Márton¹, Papp Máté¹, Turányi Tamás¹ és Nagy Tibor²
¹ *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémia Intézet, Budapest*
² *Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*
- 16:15 **Egy újabb aldehid - szulfit - lakton típusú pH-oszcillátor (15+5 perc)**
 Horváth Judit
Department of Chemical and Biological Engineering, University of Sheffield, Egyesült Királyság
- 16:35 **SZÜNET (15 perc)**
- 16:50 **Nanorendszerek reaktivitása (15+5 perc)**
 Hóltzl Tibor^{1,2}
¹ *Furukawa Electric Technológiai Intézet, Budapest*
² *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, MTA-BME Számítógépezérelt Kémia Kutatócsoport*
- 17:10 **Poliatom-poliatom típusú S_N2 reakció dinamikájának vizsgálata: az NH₂ + CH₃I reakció esete (10+5 perc)**
Tasi Domonkos és Czakó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 17:25 **Arany nanorészecskék előállítása reakció-diffúzióval (15+5 perc)**
 Farkas Szabolcs¹, Holló Gábor², Schusztér Gábor³, Deák Ágota³, Janovák László³, Horváth Dezső⁴, Tóth Ágota³ és Lagzi István^{2,5}
¹ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar*
² *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport*
³ *Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék*
⁴ *Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék*
⁵ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék*
- 17:45 **SZÜNET (15 perc)**
- 18:00 **Az α-alanin protonaffinitásának és gázfázisú bázicitásának nagy pontosságú elméleti kémiai meghatározása (15+5 perc)**
Dékány Attila és Czakó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 18:20 **Kémiaoktatás Birminghamben Covid előtt és alatt (20+5 perc)**
 Bánsági Tamás
School of Chemistry, University of Birmingham, Egyesült Királyság
- 18:45 **VACSORASZÜNET (1 óra 15 perc)**
- 20:00 **A bor, a palack és a megvilágítás (disz)harmóniája, avagy melyik polcra vásároljunk bort? (30+ perc)**
 Keszei Ernő
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémia Intézet, Budapest

Budapest, 2021. május 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 „MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottságának ülése” Zoom üléshez csatlakozni az alábbi link:

<https://us02web.zoom.us/j/87202795185?pwd=eXhwRldxQm5GR1RqRnZNNWQrbHpUQT09>

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

Meeting ID: 872 0279 5185, Passcode: 998015

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).

Továbbá az előadókat kérem, hogy helyezék a nevük elé az előadásuk tervezett idejét, ezzel is segítve a host munkáját.
Például: 14:00 Szöveg Elek (Közép-európai Aranyásó Főiskola, Alkímia Tanszék)