




MEGHÍVÓ

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága soron következő tudományos ülését 2021. október 21-22-én a Mátrafüredi Akadémiai Üdülőben (3232 Mátrafüred, Akadémia utca 1-3.) tartja, amelyre tisztelettel meghívjuk Önt. A járványhelyzetre való tekintettel 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 személyes jelenléttel részt venni csak érvényes védettségi igazolvánnyal lehet. Az ülésen való jelenléti részvételre 2021. október 11-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. További információk a helyszínnel, a szállással, az odautazással, illetve a webináriumhoz való csatlakozással kapcsolatban a program után találhatóak.

PROGRAM

Október 21., csütörtök

10:00 Megnyitó (10 perc)

Tóth Ágota, elnök

Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

10:10 pH oszcillációk tervezése és a lebegés jelenségének létezése semlegesítési reakcióban (15+5 perc)

Hugh Shearer Lawson¹, Holló Gábor², Német Norbert¹, Satoshi Teraji³, Hideyuki Nakanishi³, Horváth Róbert⁴ és Lagzi István^{1,2}

¹ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék*

² *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport, Budapest*

³ *Kyoto Institute of Technology, Department of Macromolecular Science and Engineering, Kyoto, Japán*

⁴ *ELKH Energiatudományi Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet*

10:30 Atom + etán és nitrogén-centrumú S_N2 reakciók dinamikája (15+5 perc)

Papp Dóra és Czákó Gábor

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

10:50 Előzetes megjegyzések a kinetikához - ifjakkak és örökifjakkak (10+10 perc)

Tóth János

¹ *Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Analízis Tanszék*

² *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Reakciókinetikai Laboratórium, Budapest*

11:10 SZÜNET (15 perc)

11:25 Polimer vezikulumok pH oszcillátor-vezérelt előállítás és periodikus önszerveződése (15+10 perc)



Poros-Tarcali Eszter¹ és Juan Pérez-Mercader^{1,2}

¹ *Department of Earth and Planetary Sciences and Origins of Life Initiative, Harvard University, Cambridge, Massachusetts, Amerikai Egyesült Államok*


² *Santa Fe Institute, Santa Fe, New Mexico, Amerikai Egyesült Államok*

11:50 Benzofenon fotoredukciója alifás alkoholokkal. Érdemes-e foglalkozni régi rendszerekkel? (30+10 perc)

Demeter Attila

Természetudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest

12:30 EBÉD (2 óra)

- 14:30  **Késleltetett mechanikai válasz a kémiai kinetikára a Belouszov-Zsobotyinszkij-reakció által vezérelt önszcilláló hidrogélekben (30+10 perc)**
Gehér-Herczegh Tünde¹, Zuowei Wang¹, Tsukuru Masuda², Ryo Yoshida², Nandini Vasudevan¹ és Yoshikatsu Hayashi¹
¹ *School of Biological Sciences, University of Reading, Reading, Egyesült Királyság*
² *School of Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, Japan*
- 15:10 **A reakciósebesség hatása a vékony folyadék rétegben kialakuló áramlásvezérelt csapadékmintázatokra (15+5 perc)**
Balog Edina¹, Papp Paszkál¹, Tóth Ágota¹, Horváth Dezső² és Schusztér Gábor¹
¹ *Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék*
² *Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék*
- 15:30 **SZÜNET (10 perc)**
- 15:40  **Rendezetlenség indukált önszerveződés: elektrokémiai oszcillátorhálózatok szinkronizációja (30+10 perc)**
Kiss István Zalán, Jorge L. Ocampo Espindola and Michael Sebek
Department of Chemistry, Saint Louis University, St. Louis, Missouri, Amerikai Egyesült Államok
- 16:20 **Toluene oxidation by CuO₂⁺ as catalyst: a DFT study (15+5 perc)**
Matthieu Regnacq¹, Alexandre Lebon¹, Antony Memboeuf¹ and György Lendvay²
¹ *Université de Bretagne Occidentale, Brest, France*
² *Institute of Materials and Environmental Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, Budapest*
- 16:40 **SZÜNET (10 perc)**
- 16:50 **Gas kinetics studies: a short history of laser photolytic radical production in a flow reactor coupled to a photoionization mass spectrometer detection (15+5 perc)**
Raimo S. Timonen
Department of Chemistry, University of Helsinki, Finland
- 17:10 **On the gas-phase reactivity of organic radicals (30+10 perc)**
Timo T. Pekkanen
Department of Chemistry, University of Helsinki, Finland
- 17:50 **SZÜNET (10 perc)**
- 18:00 **Molekulák hasonlóságának számítása gyorsabban és nagyobb változékonysággal (25+5 perc)**
Héberger Károly
Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest
- 18:30 **Réteges szerkezet kialakítása exfoliált réteges kettős hidroxid nanolemezek önszerveződésével (10+10 perc)**
Szerlauth Adél, Balog Edina, Varga Gábor, Schusztér Gábor és Szilágyi István
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
- 18:50 **VACSORA (70 perc)**
- 20:00 **Meséljenek a molekulák: kémiaoktatás a kémia jelrendszere nélkül**
Lente Gábor
Pécsi Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

Október 22., péntek

REGGELI

- 9:00 **Szennyezők eltávolítása nyersvízből kén(IV) indukált autooxidációval (10+5 perc)**
Truzsi Alexandra, Elek János és Fábián István
Debreceni Egyetem, Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék
- 9:15 **Az OH gyök reakciója metán, etán és glicin molekulákkal (15+5 perc)**
Gruber Balázs és Czakó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

- 9:35 **Ca(II)-alginát virágoskertek vizsgálata foszfácionok jelenlétében (15+10 perc)**
Zahorán Réka¹, Kumar Pawan¹, Horváth Dezső² és Tóth Ágota¹
¹ Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
² Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék
- 10:00 **SZÜNET (10 perc)**
- 10:10 **A OH- + CH₃F reakció dinamikai vizsgálata: az oxidion szubsztitúció (15+5 perc)**
 Tasi Domonkos Attila és Czákó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 10:30 **Új, nagy hatékonyságú, két-foton aktív cage-GABA vegyület elméleti tervezése, szintézise és in vitro neurobiológiai alkalmazása epileptikus aktivitás kutatásában (15+10 perc)**
Mucsi Zoltán^{1,2}, Kovács Ervin^{1,3}, Csizmadia Imre G.⁶, Szalay Gergely⁴, Chiovini Balázs⁴, Pálfi Dénes⁵, Rózsa Balázs⁴, Katona Gergely⁵, Szőri Milán²
¹ Femtonics Kft, Budapest
² Miskolci Egyetem, Kémia Intézet, Miskolc
³ Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest
⁴ Ideghálózatok és Dendritikus Integráció 3D Funkcionális Képző Laboratórium, Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézet, Budapest
⁵ Két-Foton Méréstechnológiai Kutatócsoport, Információs Technológiai és Bionikai Kar, Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Budapest
⁶ Torontói Egyetem, Torontó, Kanada
- 10:55 **SZÜNET (10 perc)**
- 11:05 **Formaldehid-szulfít órareakció alkalmazása ZIF-8 típusú szerves fémkoordinációs vázszerkezetek kialakításához (15+10 perc)**
 Német Norbert¹, Holló Gábor⁴, Federico Rossi², Schuszter Gábor³, Tóth Ágota³, Horváth Dezső³, Lagzi István László^{1,4}
¹ BME, Fizika Tanszék, Önrendező és Önszerveződés Kutatócsoport, Budapest
² University of Siena, Siena, Olaszország
³ Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Nemlineáris Dinamika és Kinetika csoport
⁴ MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport, Budapest
- 11:30 **A Cl + CH₃NH₂ reakció potenciálisenergia-felületének nagy pontosságú ab initio feltérképezése (10+5 perc)**
Szűcs Tímea és Czákó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport
- 11:45 **α-alanin oxidációja hipoklórossavval (10+5 perc)**
Simon Fruzsina, Szabó Mária és Fábíán István
Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
- 12:00 **EBÉD**

Budapest, 2021. október 8.

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 „RKFMB őszi ülése” Zoom üléshez csatlakozni az alábbi link:

<https://us02web.zoom.us/j/83368120267?pwd=T3RlSkNYa3kzR3R4MVU3a3Z0TDA3Zz09>

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

Meeting ID: 833 6812 0267

Passcode: 397290

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", 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.

JELENTKEZÉSI LAP

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága
2021. október 21-22-én a Mátrafüredi Akadémiai üdülőben tartandó ülésére.

Elektronikusan kitöltve beküldendő:
nagy.tibor@ttk.hu email címre
2021. október 11-e 12 óráig.

Név:

Intézmény:

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

Online részvétel []
Jelenléti részvétel október 21-én délelőtt/délután []/[]
Jelenléti részvétel október 22-én délelőtt []

Jelenléti részvétel esetén szállás és ellátási igények:

Nem kérek szállást és ellátást 0.Ft/fő []
Egyágyas szállás teljes ellátással IFÁ-val 23.770.Ft/fő []
Kétágyas szállás teljes ellátással IFÁ-val 21.490.Ft/fő []

részleges igény esetén:

október 21-én ebéd (3 fogásos) 3.000.Ft/fő []
október 21-én vacsora (2 fogásos) 2.500.Ft/fő []
október 21-én kétágyas szállás + reggeli + IFA 12.990.Ft/fő/éj []
[11.400 + 1.100 + 490]
október 21-én egyágyas szállás + reggeli + IFA + szállás felár 15.270.Ft/fő/éj []
[11.400 + 1.100 + 490 + 2.280]
október 22-én ebéd (3 fogásos) 3.000.Ft/fő []

Vegetáriánus étkeztetést szeretnék kérni: []

A feltüntetett árak az ÁFÁ-t tartalmazzák.

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

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

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:

....., 2021. október nap

.....
aláírás