



Magyar Tudományos Akadémia
Kémiai Tudományok Osztály
Fizikai Kémiai Bizottság
Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság

Meghívó

Tisztelt Kolléga!

Az MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsága soron következő tudományos ülését 2024. május 30–31-én a **Balatonvilágosi Akadémiai Üdülőben** tartja, amelyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés jelenléti formában kerül megrendezésre az alábbi programpontok szerint. **Az ülésen való részvételre 2024. május 6 (hétfő) délig lehet jelentkezni a körlevélhez csatolt Excel fájl kitöltésével**, amelyet a schusztii@chem.u-szeged.hu e-mail címre kérünk visszaküldeni. További információk a helyszínről és a szállásról a program után találhatóak.

Program

Május 30., csütörtök délelőtt

- 10:00 **Megnyitó (5 perc)**
Nagy Tibor, elnök
HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezatkémiai Intézet, Budapest
- 10:05 **Fotokromizmus β -ciklodextrin típusú makrociklusokban (20 + 10 perc)**
Miskolczy Zsombor, Megyesi Mónika, Biczók László
HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezatkémiai Intézet, Budapest
- 10:35 **HCN adszorpciójának szimulációs vizsgálata különböző jégfelületeken (15 + 10 perc)**
Szőri Milán
Miskolci Egyetem, Kémia Intézet
- 11:00 **A központi atom hatásának elméleti vizsgálata ion–molekula reakciók dinamikájában (20 + 10 perc)**
Papp Dóra, Erdei Laura, Gál Dorina, Giricz Anett, Gyimesi Réka, Czakó Gábor
MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szegedi Tudományegyetem
- 11:30 **Szünet (15 perc)**
- 11:45 **Csapadékképződési folyamatok modellezése (30 + 10 perc)** – Ph.D. értekezés alapjával szolgáló eredmények előzetes bemutatása
Papp Paszkál¹ (témavazető: Horváth Dezső²)
¹*Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szegedi Tudományegyetem*
²*Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem*
- 12:25 **Ebédszünet (65 perc)**

Május 30., csütörtök délután

- 13:30 **Reakció–diffúzió rendszerek felhasználása anyagok előállítására (20 + 10 perc)**
Lagzi István^{1,2}
¹*Fizika Tanszék, Fizika Intézet, BME*
²*HUN-REN-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport, BME*
- 14:00 **Identification of well-parameterized reaction steps in detailed combustion mechanisms – the case study of ammonia/air flames (15 + 10 perc)**
András György Szanthoffer^{1,2}, Máté Papp^{1,3}, Tamás Turányi¹
¹*Kémiai Intézet, ELTE, Budapest*
²*Hevesy György Kémiai Doktori Iskola, ELTE*
³*HUN-REN - ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport*
- 14:25 **Szünet (15 perc)**
- 14:40 **Symbolic Solution of Polynomial Differential Equations Via Cauchy–Riemann Equations with Applications to Some Kinetic Differential Equations (20 + 10 perc)**
Kelvin Kiprono¹, Tóth János^{1,2}
¹*Department of Analysis and Operations Research, BME*
²*Chemical Kinetics Laboratory, ELTE*
- 15:10 **Radioaktív stroncium dekorporáció vizsgálata alkáliföldfém ionok komplexképződésének számítógépes analízisén keresztül (15 + 10 perc)**
Horváth Tamás, Szőri Milán, Rózsa Zsófia Borbála
Miskolci Egyetem, Kémia Intézet
- 15:35 **Biológiai membránok megfestésére alkalmas fluoreszcens festékek gerjesztési tulajdonságainak vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel (15 + 10 perc)**
Bitó Patrik, Szőri Milán, Rózsa Zsófia Borbála
¹*Miskolci Egyetem, Kémia Intézet*
- 16:00 **Szünet (20 perc)**
- 16:20 **A reakciómérték helyes értelmezése egyensúlyi reakciókra (20 + 10 perc)**
Gáspár Vilmos
- 16:50 **Szokatlan kinetikai jelenségek gyógyszerhatóanyagok kioldódása során (15 + 5 perc)**
Kalmár József¹, Orosz László István¹, Forgács Attila¹, Fábián István^{1,2}
¹*Debreceni Egyetem*
²*HUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport*
- 17:10 **S_N2 reakció két reaktív centrummal: A CN⁻ + CH₃I rendszer dinamikája egy globális potenciálisenergia-felületen (10 + 5 perc)**
Szűcs Tímea, Czakó Gábor
MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szegedi Tudományegyetem
- 17:25 **Önfertőtlenítő elektroszálhúzott anyagok (10 + 5 perc)**
Kiss Eszter¹, Szabó Mária^{1,2}, Fábián István^{1,2}
¹*Debreceni Egyetem*
²*HUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport*

Május 30., csütörtök délután (folyt.)

- 17:40 **Mire használhatjuk a kinetikai görbék görbületét? (25 + 10 perc)**
Lawrence Bordoh¹, Vignesh Narayanan², Jr-Shin Li², István Z. Kiss¹
¹*Department of Chemistry, Saint Louis University (MO, USA)*
²*Department of Electrical and Systems Engineering, Washington University in St Louis (MO, USA)*
- 18:15 **Vacsora (75 perc)**
- 19:30 **Rendhagyó laboratóriumi gyakorlatok az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaversenyen (esti előadás)**
Musza Katalin, Schusztar Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Május 31., péntek délelőtt

- 09:00 **Peroxodiszulfát–tiosulfát–réz(II) oszcilláló reakció modellezése (20 + 10 perc)**
Szalai István
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Budapest
- 09:30 **Kalcium-karbonát képződésének tér- és időbeli jellemzése mikrofluidikai reaktorban (10 + 5 perc)**
Ádám Mária Rebeka, Papp Paszkál, Tóth Ágota
Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szegedi Tudományegyetem
- 09:45 **Mechanism reduction-assisted parameter optimization of the ethylene chemistry in the AramcoMech 2.0 combustion mechanism (15 + 10 perc)**
Boyang Su^{1,2}, Tibor Nagy³, Máté Papp^{1,4}, István Gy. Zsély¹, Tamás Turányi¹
¹*Kémiai Intézet, ELTE, Budapest*
²*Hevesy György Kémiai Doktori Iskola, ELTE*
³*Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*
⁴*HUN-REN - ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport*
- 10:10 **Aszparaginsav klórozása HOCl felesleg mellett (10 + 5 perc)**
Angyal Dávid², Szabó Mária^{1,2}, Fábrián István^{1,2}
¹*Debreceni Egyetem*
²*HUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport*
- 10:25 **Szünet (15 perc)**
- 10:40 **Optimization of a methanol/NOx combustion mechanism based on a large amount of experimental data (15 + 10 perc)**
Márton Kovács^{1,2}, Máté Papp^{1,3}, András György Szanthoffer^{1,2}, István Gyula Zsély¹, Tibor Nagy⁴, Tamás Turányi¹
¹*Kémiai Intézet, ELTE, Budapest*
²*Hevesy György Kémiai Doktori Iskola, ELTE*
³*HUN-REN - ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport*
⁴*Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*
- 11:05 **Ritkaföldfém-szilikát csövek áramlásvezérelt szintézise és jellemzése (10 + 5 perc)**
Farkas Panna, Tóth Ágota
Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szegedi Tudományegyetem
- 11:20 **Természetes alapú részecskék mikroorganizmus adszorpciók képességének vizsgálata (15 + 10 perc)**
Kecskés Karina, Szőri-Dorogházi Emma
Miskolci Egyetem, Kémia Intézet

Május 31., péntek délelőtt (folyt.)

11:45 **Butanol izomerek égési reakciómechanizmusának kinetikai paraméter optimalizációja nagy kísérleti adatkészleten (10 + 5 perc)**

Horváth László^{1,2}, Papp Máté^{1,3}, Turányi Tamás², Nagy Tibor¹

¹*HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*

²*Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Budapest*

³*HUN-REN-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport, ELTE, Budapest*

12:00 **Váratlan jelenségek az NH₃ klórozása során savas közegben (10 + 5 perc)**

Simon Fruzsina², Szabó Mária^{1,2}, Fábíán István^{1,2}

¹*Debreceni Egyetem*

²*HUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport*

12:30 **Ebéd**

Tisztelettel,

Nagy Tibor, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság elnöke

Schuszter Gábor, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság titkára

Helyszín- és szállásinformációk

A munkabizottsági ülés helyszíne a Balatonvilágosi Akadémiai Üdülő

<https://udulo.mta.hu/uduloink/balatonvilagosi-akademiai-udulo>

Cím: 8171 Balatonvilágos, Rákóczi út 31.; **GPS koordináták:** É 46°57'21.91" K 18°09'00.58"

E-mail: vilagos@udulo.mta.hu; **Telefon:** (88) 480-851