



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](mailto: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  $\beta$ -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 Paszkál<sup>1</sup> (témavazető: Horváth Dezső<sup>2</sup>)  
<sup>1</sup>*Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szegedi Tudományegyetem*  
<sup>2</sup>*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<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>*Fizika Tanszék, Fizika Intézet, BME*  
<sup>2</sup>*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<sup>1,2</sup>, Máté Papp<sup>1,3</sup>, Tamás Turányi<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>*Kémiai Intézet, ELTE, Budapest*  
<sup>2</sup>*Hevesy György Kémiai Doktori Iskola, ELTE*  
<sup>3</sup>*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 Kiprono<sup>1</sup>, Tóth János<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>*Department of Analysis and Operations Research, BME*  
<sup>2</sup>*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  
<sup>1</sup>*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 József<sup>1</sup>, Orosz László István<sup>1</sup>, Forgács Attila<sup>1</sup>, Fábián István<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>*Debreceni Egyetem*  
<sup>2</sup>*HUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport*
- 17:10 **S<sub>N</sub>2 reakció két reaktív centrummal: A CN<sup>-</sup> + CH<sub>3</sub>I 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 Eszter<sup>1</sup>, Szabó Mária<sup>1,2</sup>, Fábián István<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>*Debreceni Egyetem*  
<sup>2</sup>*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 Bordoh<sup>1</sup>, Vignesh Narayanan<sup>2</sup>, Jr-Shin Li<sup>2</sup>, István Z. Kiss<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>*Department of Chemistry, Saint Louis University (MO, USA)*  
<sup>2</sup>*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, Schuszter 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<sup>1,2</sup>, Tibor Nagy<sup>3</sup>, Máté Papp<sup>1,4</sup>, István Gy. Zsély<sup>1</sup>, Tamás Turányi<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>*Kémiai Intézet, ELTE, Budapest*  
<sup>2</sup>*Hevesy György Kémiai Doktori Iskola, ELTE*  
<sup>3</sup>*Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*  
<sup>4</sup>*HUN-REN - ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport*
- 10:10 **Aszparaginsav klórozása HOCl felesleg mellett (10 + 5 perc)**  
Angyal Dávid<sup>2</sup>, Szabó Mária<sup>1,2</sup>, Fábián István<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>*Debreceni Egyetem*  
<sup>2</sup>*HUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport*
- 10:25 **Szünet (15 perc)**
- 10:40 **Optimization of a methanol/NO<sub>x</sub> combustion mechanism based on a large amount of experimental data (15 + 10 perc)**  
Marton Kovács<sup>1,2</sup>, Máté Papp<sup>1,3</sup>, András György Szanthoffer<sup>1,2</sup>, István Gyula Zsély<sup>1</sup>, Tibor Nagy<sup>4</sup>, Tamás Turányi<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>*Kémiai Intézet, ELTE, Budapest*  
<sup>2</sup>*Hevesy György Kémiai Doktori Iskola, ELTE*  
<sup>3</sup>*HUN-REN - ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport*  
<sup>4</sup>*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<sup>1,2</sup>, Papp Máté<sup>1,3</sup>, Turányi Tamás<sup>2</sup>, Nagy Tibor<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>*HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Budapest*  
<sup>2</sup>*Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet, Budapest*  
<sup>3</sup>*HUN-REN-ELTE Komplex Kémiai Rendszerek Kutatócsoport, ELTE, Budapest*
- 12:00 **A Cl + CH<sub>3</sub>CN reakció dinamikájának vizsgálata automatikusan fejlesztett teljes dimenziós ab initio potenciálisenergia-felületen (10 + 5 perc)**  
Tóth Petra, Szűcs Tímea, Czakó Gábor  
*MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szegedi Tudományegyetem*
- 12:15 **Váratlan jelenségek az NH<sub>3</sub> klórozása során savas közegben (10 + 5 perc)**  
Simon Fruzsina<sup>2</sup>, Szabó Mária<sup>1,2</sup>, Fábíán István<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>*Debreceni Egyetem*  
<sup>2</sup>*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