



REAKCIÓKINETIKAI ÉS FOTOKÉMIAI MUNKABIZOTTSÁG

KOORDINÁCIÓS KÉMIAI MUNKABIZOTTSÁG

Munkabizottsági ülés: 2018. november 8-9., Veszprém

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

A Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság és a VEAB Kémiai Szakbizottság közös tudományos ülését 2018. november 8-9-én tartja Veszprémben, melyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés az MTA Veszprémi Területi Bizottságának székházában (8200, Veszprém, Vár utca 37.) kerül megrendezésre az alábbi programponatok szerint.

November 8., csütörtök

10:00 Megnyitó (5 perc)

Lente Gábor, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság elnöke

Pécsi Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

10:05 Arany nanorészecskék előállítása liposzómákban (15+5 perc)

Medveczky Zsófia¹, Lagzi István^{1,2}, Holló Gábor², Ylenia Miele³, Federico Rossi³

¹ *BME Fizika Tanszék*

² *MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport*

³ *University of Salerno, Olaszország*

10:25 Halogénatom + etán reakciók potenciálisenergia-felületeinek nagypontosságú ab initio feltérképezése (15+5 perc)

Papp Dóra, Gruber Balázs és Czakó Gábor

Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

10:45 Fémrácsok duzzadása és regenerációja ion sugárzás hatására, kontakt potenciál változások kinetikája (15+5 perc)

Horváth Ákos, Nagy Norbert, Vértesy Gábor, Schiller Róbert

MTA Energiatudományi Kutatóközpont

11:05 Szünet (10 perc)

11:15 Redukált-dimenziós reakciódinamikai modellek klasszikus mechanikai alkalmazásának problémái (15+5 perc)

Nagy Tibor, Vikár Anna, Lendvay György

MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezatkémiai Intézet

11:35 Gyűrűs éterek és észterek környezeti kémiája: reakciókinetikai és fotokémiai kutatások - PhD értekezés alapjául szolgáló eredmények előzetes bemutatása (30+10 perc)

Illés Ádám (témavezető: Dóbé Sándor)

MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezatkémiai Intézet

12:15 Szünet (1 óra 25 perc)

13:40 A perjudátionok vizes oldatbeli egyensúlyai és stabilitása (15+5 perc)

Valkai László^{1,2}, Peintler Gábor³, Marton Antal¹, Yelena Koshman¹, Horváth Attila¹

¹ *Pécsi Tudományegyetem, Szervetlen Kémia Tanszék*

² *Pécsi Tudományegyetem, Szentágothai János Kutatóközpont*

³ *Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék*

14:00 Az X + CH₃Y [X = OH, SH, CN, PH₂, NH₂; Y = F, Cl, Br, I] S_N2 reakciók inverziós és retenciós reakcióútjainak nagypontosságú ab initio feltérképezése (15+5 perc)

Tasi Domonkos Attila, Fábíán Zita és Czákó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

14:20 Liposzómák pH indukált osztódása (15+5 perc)

Lagzi István^{1,2}, Medveczky Zsófia¹, Holló Gábor², Ylenia Miele³, Federico Rossi³
¹ *BME Fizika Tanszék* ² *MTA-BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoport*
³ *University of Salerno, Olaszország*

14:40 Szünet (10 perc)

14:50 Infravörös spektrumokban megfigyelhető izotópeltolódások értelmezése tömeg-korrelációs diagramok segítségével (15+5 perc)

Szántó Judit Katalin, Lendvay György
MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezatkémiai Intézet

15:10 Rezgési és forgási állapotösszegek szerepe mélyhűtött nagy szénmolekulák laboratóriumi és kozmikus infravörös gázfázisú spektroszkópiájában (15+5 perc)

Nemes László¹, Nagy Tibor¹, Marcel Drabbels²
¹ *MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezatkémiai Intézet*
² *École polytechnique fédérale de Lausanne, Svájc*

15:30 Tömegeffektusok a $\text{CH}_3+\text{HBr} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{Br}$ reakcióban (15+5 perc)

Csorba Benjámín¹, Szabó Péter², Lendvay György¹
¹ *MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezatkémiai Intézet*
² *University of Luleå, Svédország*

15:50 Szünet (10 perc)

16:00 Egy göcképződés-növekedés típusú nanorészecske-növekedési modell sebességi egyenletének analitikus megoldása (15+5 perc)

Szabó Réka¹, Lente Gábor²
¹ *Debreceni Egyetem*
² *Pécsi Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék*

16:20 A $\text{F}^- + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$ reakció komplex potenciálisenergia-felületének nagypontosságú ab initio feltérképezése (15+5 perc)

Tajti Viktor, Czákó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

16:40 Királis N, S ligandumok: szintézis, koordinációs kémia és katalitikus tulajdonságok (15+5 perc)

Major Máté Miklós, Bényei Attila, Lendvay György, Bakos József, Farkas Gergely
Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

17:00 Szünet (10 perc)

17:10 Potenciálisenergia-felületek fejlesztésének automatizálása (15+5 perc)

Győri Tibor, Czákó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

17:30 Lantanoida(III)-porfirin komplexek képződésének és fotoindukált tulajdonságainak vizsgálata (15+5 perc)

Valicsek Zsolt, Kiss Melitta Patrícia, Muhammad Imran, Horváth Ottó
Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

17:50 A $\text{F}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció dinamikájának és mikroszolvatációjának elméleti vizsgálata (15+5 perc)

Olasz Balázs, Czákó Gábor
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

18:10 Szünet (1 óra 50 perc)

20:00 Beszámoló kínai újajairól – szórakoztató előadás (60 perc)

Bányai István
Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

November 9., péntek

10:00 Megnyitó (5 perc)

Kaizer József, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság elnöke

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

10:05 Háromfogú királis P, N, N és P, N, O ligandumok koordinációs és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata (15+5 perc)

Császár Zsófia, Bényei Attila, Lendvay György, Bakos József, Farkas Gergely

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

10:25 Transzszulfurációs utak átprogramozásának jelentősége tumorprogresszióban (15+5 perc)

Erdélyi Katalin, Nagy Péter

Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológia és Toxikológia Osztály

10:45 Nem-hém vastartalmú flavon szintáz modellek vizsgálata (15+5 perc)

Kripli Balázs, Speier Gábor, Kaizer József

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

11:05 Szünet (10 perc)

11:15 Karboximetil-polietilénimin paramágneses fémionokkal alkotott komplexeinek szerkezete és dinamikája (15+5 perc)

Miklósi Tamás, Kiss Virág, Novák Levente, Bányai István

Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

11:35 Nitrozoperszulfid: egy újabban azonosított szulfán kén donor molekula, elnyújtott és széles körű fehérje per- és poliszulfidációs hatással (15+5 perc)

Bogdándi Virág¹, Bártai István Zoárd², Magda Minnion³, Sándor Zoltán², Pintér Erika², Martin Feelisch³, Nagy Péter¹

¹ *Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológia és Toxikológia Osztály*

² *Pécsi Tudományegyetem, Általános Orvostudományi Kar*

³ *Clinical and Experimental Sciences, Faculty of Medicine, and University Hospital Southampton NHS Foundation Trust, Egyesült Királyság*

11:55 Szenzorként alkalmazható ferrocén tartalmú karbamidszármazékok vizsgálata (15+5 perc)

Keszei Soma, Balogh Szabolcs, Nagy Livia, Skodáné Földes Rita, Lendvay György

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

12:15 Szünet (1 óra 25 perc)

13:40 Triaza és tetraaza aminopolikarboxilát ligandumok ritkaföldfém(III) és gallium(III) komplexei, mint biztonságos teragnosztikai készítmények az orvosi képalkotásban: kinetika, egyensúly és szerkezet - MTA dolgozat előzetes bemutatója (45+15 perc)

Baranyai Zsolt^{1,2}

¹ *Bracco Imaging S.p.A, Olaszország*

² *Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék*

14:40 Szünet (10 perc)

14:50 Hisztidint és/vagy metionint tartalmazó peptidok oxidációját befolyásoló tényezők vizsgálata (15+5 perc)

Kállay Csilla

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

15:10 Hidrogén-szulfid koncentrációjának meghatározása vérmintákból (15+5 perc)

Ditrói Tamás, Nagy Attila, Nagy Péter

Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológia és Toxikológia Osztály

15:30 Szabályozott fehérjealapú mesterséges enzimek fejlesztése

Gyurcsik Béla, Hajdu Bálint, Heba A.H. Abd Elhameed, Balogh Ria Katalin, Hermann Enikő, Németh Eszter

Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

15:50 Szünet (10 perc)

16:10 Várhatóan hipoxia-aktivált fluoreszcens Co(III)-komplexek szintézise és vizsgálata (15+5 perc)

Ozsváth András, Kapitány Réka, Buglyó Péter
Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

16:30 A perszulfidáció és a tioredoxin rendszer együttműködése funkcionális ciszteinek védelmében irreverzibilis oxidáció ellen (45+15 perc)

Dóka Éva¹, Yumi Abiko⁴, Markus Dagnell², Tomoaki Ida⁵, Noémi Balog¹, Belen Espinosa², Nho Luong Cong⁴, Akira Nishimura⁵, Elias Arnér², Ed Schmidt³, Yoshito Kumagai⁴, Takaaki Akaike⁵, Nagy Péter¹

¹ *Országos Onkológiai Intézet, Molekuláris Immunológia és Toxikológia Osztály*

² *Department of Medical Biochemistry and Biophysics, Division of Biochemistry, Karolinska Institutet, Stockholm, Svédország*

³ *Department of Microbiology and Immunology, Montana State University, Montana, USA*

⁴ *Environmental Biology Section, Faculty of Medicine, University of Tsukuba, Tsukuba, Japán*

⁵ *Department of Environmental Health Sciences and Molecular Toxicology, Tohoku University Graduate School of Medicine, Sendai, Japán*

16:50 Enantioselective C-H bond oxidation and epoxidation reactions by chiral tetrapyrrolyl oxoiron(IV) complex (15+5 perc)

Bashdar I. Meena, Balázs Kripli, Gábor Speier, József Kaizer
Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

17:10 Elnöki zárszó (5 perc)

Lente Gábor és Kaizer József

Tisztelettel,

Dr. Lente Gábor, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság elnöke

Dr. Nagy Tibor, a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság titkára

Dr. Kaizer József, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság és
a VEAB Kémiai Szakbizottság elnöke

Dr. Enyedy Éva Anna, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság titkára

Dr. Valiskó Mónika, a VEAB Kémiai Szakbizottság titkára