

Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság (AMMB)

2023.11.24-25. - plenáris ülés programja

Péntek

12:00 - 13:15		ebéd
13:15 - 13:25		megnyitó
13:25 - 14:50		1. szekció, elnök: Bombicz Petra
13:25-13:50	Nemes László (ELKH, TTK)	Megfigyelhető-e a C_{70} kation laboratoriumi mikrohullamu vagy/es radiocsillagászati módszerekkel? Eelőzetes spekulációk.
13:50-14:10	Tasi Domonkos Attila (SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)	A $OH^- + CH_3F/CH_3I$ reakciók dinamikájának elméleti vizsgálata
14:10-14:30	Keresztes Barbara (ELTE Kémiai Intézet, MSL)	A [H, C, N, S] izomerek asztrokémiai szempontból releváns reakcióinak vizsgálata
14:30-14:50	Mester Dávid (BME)	Báziskészletlimit CCSD(T) energia: explicit korreláció vs. sűrűségalapú báziskészlet-korrekción
14:50 - 15:10		szünet
15:10 - 16:30		2. szekció, elnök: Benkő Zoltán
15:10-15:30	Nacsa András Bence (SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)	Dynamics of competing S_N2 and $E2$ reactions
15:30-15:50	Margócsy Ádám (ELTE Kémiai Intézet, MQD)	Application of the equal-time Bethe--Salpeter relativistic QED framework for atomic and molecular computations
15:50-16:10	Szűcs Tímea (SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)	Automated potential energy surface developments and dynamics simulations for the $Cl/F + CH_3NH_2$ reactions.
16:10-16:30	Nonn Ádám (ELTE Kémiai Intézet, MQD)	Crossed Coulomb-photon corrections to the relativistic energy
16:30 - 16:50		szünet
16:50 - 18:05		3. szekció, elnök: Mátyus Edit
16:50-17:15	Bakó Imre (HUN-REN TTK)	Víz formfaktora
17:15-17:40	Surján Péter (ELTE KI Elm. Kém. Lab.)	A Davidson technika: egy kevésbé ismert eszköz
17:40-18:05	Szalontai Gábor (Pannon Egyetem)	Szilárdfázisú molekuláris mozgások hatása a CPMAS jel felépülésére. HMTA vs. TEDA
18:10 - 19:00		vacsora

Szombat

7:30 - 8:30		reggeli
8:30 - 9:50		4. szekció, elnök: Czakó Gábor
8:30-8:50	Rácsai Balázs (ELTE Kémiai Intézet, MQD)	The Drachman-Beylkin method
8:50-9:10	Gombás András (ELTE KI Elm. Kém. Lab.)	Perturbation-adapted Perturbation Theory: Towards a Multi-Reference Approach
9:10-9:30	Fekete Csilla (BME - Benkő Csoport)	Investigation of noncovalent interactions in organocatalyzed phospho-Michael addition
9:30-9:50	Góbi Sándor (ELTE Kémiai Intézet, MSL)	Energetic processing of thiones in cryogenic matrices
9:50 - 10:10		szünet
10:10 - 11:30		5. szekció, elnök: Szabados Ágnes
10:10-10:30	Jeszenszki Péter (ELTE Kémiai Intézet, MQD)	With-pair wave equation for instantaneous interactions
10:30-10:50	Szathmári Balázs (BME - Modern Szervetlen Anyagok Kutatócsoport)	Synthesis of carboranyl-siloles - new AIEgens
10:50-11:10	Horváth Ádám (BME - Benkő Csoport)	Computational Investigation of Diels-Alder Reactions
11:10-11:30	Schneider Anita (ELTE Kémiai Intézet, MSL)	Nagyobb aminosavak képződése glicinből a csillagközi térben
11:30 - 11:50		szünet
11:50 - 12:50		6. szekció, elnök: Szidarovszky Tamás
11:50-12:10	Kertész Erik (BME - Benkő Csoport)	Nehezebb pniktogén elemek kelátkomplexei: szerkezet, tautoméria, redoxi és optikai tulajdonságok
12:10-12:30	Gruber Balázs (SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)	Csatolt-klaszter minőségű potenciálisenergia- felület fejlesztése és a dinamika tanulmányozása teljes (30) dimenzióban: a glicin + OH reakció
12:30-12:50	Jelenfi Dávid Péter (ELTE KI Elm. Kém. Lab.)	Molekula rezgések hatásának vizsgálata a molekuláris elektronvezetésre
12:50 - 12:55		zárszó
13:00 -		ebéd