

## Anyag- és Molekulaszervekezeti Munkabizottság (AMMB)

2022.10.21-22. - plenáris ülés programja

### Péntek

14:15 - 14:20	megnyitó	
14:20 - 15:35	1. szekció, elnök: Bombicz Petra (TTK)	
14:20 - 14:45	Nemes László (TTK Anyag és Környezetkémia Intézet)	A C70 <sup>+</sup> kation Jahn-Teller indukált mikrohullámú spektrumának számítása
14:45 - 15:10	Hessz Dóra (BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)	Lokális viszkozitás mérése fluoreszcencia-spektroszkópiával
15:10 - 15:35	Szidarovszky Tamás (ELTE Kémiai Intézet)	Rovibrational polaritons of H <sub>2</sub> O
15:35 - 16:05	szünet	
16:05 - 18:00	2. szekció, elnök: Surján Péter (ELTE)	
16:05 - 16:35	Czakó Gábor (SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)	Computational reaction dynamics at the University of Szeged
16:35 - 17:00	Fekete Csilla (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék)	Tetrametil-guanidin szerepe foszfa-Michael-addícióban: számítási kémiai vizsgálatok
17:00 – 18:00	Fülöp Vilmos (University of Warwick)	Public lecture: Structure and molecular biology of the virus of COVID-19
18:00 – 18:20	szünet	
18:20 – 19:50	vacsora	

## Szombat

<b>9:00 - 10:40</b>	<b>1. szekció, elnök: Kubinyi Miklós (BME)</b>	
9:00 - 9:25	Benkő Zoltán (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék)	Stability of phosphorus centered cyclic radicals
9:25 - 9:50	Nacsa András (SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)	Ab initio conformational analysis of dehydrogenated and protonated amino acids
9:50 - 10:15	Kiss Etelka (BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)	Molekuláris fotokapcsoló működési mechanizmusa
10:15 - 10:40	Horváth Ádám (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék)	Anionos dienofilek Diels-Alder reakcióinak elméleti vizsgálata
<b>10:40 - 11:10</b>	<b>szünet</b>	
<b>11:10 - 12:25</b>	<b>2. szekció, elnök: Szabados Ágnes (ELTE)</b>	
11:10 - 11:35	Győri Tibor (SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék)	Towards automated potential energy surface development with Robosurfer and ManyHF
11:35 - 12:00	Kertész Erik (BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék)	Nehezebb pniktogén elemek kelát-komplexei
12:00 - 12:25	Simkó Irén (ELTE Kémiai Intézet)	The dynamical structure of the $\text{CH}_5^+$ cation
<b>12:25 - 12:30</b>	<b>zárszó</b>	