

Elméleti kémia I

9 fő

Csütörtök de / 123-as tanterem

1. Lőrincz Balázs: Szupramolekuláris és katalitikus kémiában előforduló bonyolult molekuláris kölcsönhatások pontos modellezése Témavezető: Dr. Nagy Péter
2. Ott Anna: Gyűrűs foszforgyökök stabilitása: számításos kémiai vizsgálatok" Témavezető: Dr. Benkő Zoltán
3. Kucsera Péter Mihály: B-B kötéshosszabbodás vizsgálata klozo- karboránok esetén
Témavezetők: Dr. Kelemen Zsolt, Dr. Buzsáki Dániel
4. Bicsak Richárd: Számítógépes modellkidolgozás hatóanyagok szövetspecifikus permeabilitásának előrejelzésére Témavezetők: Dr. Balogh György Tibor, Vincze Anna
5. Ecséri Gábor András: A HOCl-37 molekula kísérleti rezgési-forgási színképeinek analízise hálózatelméleti és kvantumkémiai módszerekkel Témavezető: Császár Attila Géza
6. Söjtöry Barbara Sára: Különböző rövid DNS szakaszok és policiklikus aromás szénhidrogének kölcsönhatásának elméleti vizsgálata Témavezetők: Dr. Fiser Béla, Dr. Rachid Hadjadj
7. Sipos Barnabás Iván: O(3P)+CH₄ reakció dinamikájának vizsgálata egy új ab initio globális potenciálisenergia-felületen Témavezetők: Dr. Czakó Gábor, Gruber Balázs
8. Giricz Anett: A foszfor, mint központi atom SN₂ és proton-transzfer reakcióban: a F⁻ + PH₂Cl reakció dinamikájának elméleti modellezése Témavezetők: Dr. Czakó-Papp Dóra, Dr. Czakó Gábor
9. Kígyósi Máté: A szerin kvantumkémiai konformációs analízise és ab initio proton affinitása
Témavezetők: Dr. Czakó Gábor, Nacsa András Bence