

## Elméleti kémia I

8 fő

Csütörtök de / 123-as tanterem

1. Szalay Máté: Töltések és a dópoló atomok szerepe a rézklasztereken történő CO<sub>2</sub> redukcióra  
Témavezető: Dr. Höltzl Tibor
2. Fekete Csilla: Acilfoszfinok foszfa-Michael-addíciója: a mechanizmus felderítése és szubsztituens-hatások vizsgálata  
Témavezető: Dr. Benkő Zoltán
3. Horváth Ádám: Anionos dienofilek Diels-Alder cikloaddícióinak elméleti vizsgálata  
Témavezető: Dr. Benkő Zoltán
4. Laczkó Gergely: Hatékony számítási protokoll tervezése halociklizációs reakciók leírására  
Témavezetők: Pápai Imre, Nagy Péter
5. Saly Eszter: Integrálok automatizálása relativisztikus mátrixelemekhez  
Témavezetők: Mátyus Edit, Ferenc Dávid
6. Tokaji Csenge: A OH<sup>-</sup> + CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>Y [Y = F, Cl, Br, I] reakciók potenciálisenergia-felületeinek nagy pontosságú kvantumkémiai vizsgálata  
Témavezetők: Tasi Domonkos Attila, Dr. Czakó Gábor
7. Tóth Petra: A Cl + CH<sub>3</sub>CN reakció absztrakciós és szubsztitúciós útvonalainak nagy pontosságú kvantumkémiai vizsgálata  
Témavezetők: Szűcs Tímea, Dr. Czakó Gábor
8. Kerekes Zsolt: Ambidens nukleofil SN<sub>2</sub> reakciójának kvantumkémiai vizsgálata: a CN<sup>-</sup> + CH<sub>3</sub>Y [Y = F, Cl, Br, I] esete  
Témavezetők: Tasi Domonkos Attila, Dr. Czakó Gábor