

Elméleti kémia II

8 fő

Péntek du / 123-as tanterem

1. Szalay Máté: Töltések és a dópoló atomok szerepe a rézklasztereken történő CO₂ 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⁻ + CH₃CH₂Y [Y = F, Cl, Br, I] reakciók potenciálisenergia-felületeinek nagypontosságú kvantumkémiai vizsgálata
Témavezetők: Tasi Domonkos Attila, Dr. Czakó Gábor
7. Tóth Petra: A Cl + CH₃CN reakció absztrakciós és szubsztitúciós útvonalainak nagypontosságú kvantumkémiai vizsgálata
Témavezetők: Szűcs Tímea, Dr. Czakó Gábor
8. Kerekes Zsolt: Ambidens nukleofil SN₂ reakciójának kvantumkémiai vizsgálata: a CN⁻ + CH₃Y [Y = F, Cl, Br, I] esete
Témavezetők: Tasi Domonkos Attila, Dr. Czakó Gábor