

Elméleti kémia II.

2025. 04. 10. (csütörtök), LC.0.07

Zsűri

Elnök:	Dr. Stirling András	<i>egyetemi tanár</i>	EKKE
Tagok:	Dr. Bende Attila	<i>tudományos főmunkatárs</i>	INCDTIM
	Dr. Tajti Attila	<i>tudományos munkatárs</i>	ELTE

8:00	Bitó Patrik	Biológiai membránok megfestésére alkalmas fluoreszcens festékek gerjesztési tulajdonságainak vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel	Dr. Szőri Milán	ME
8:20	Ecseri Gábor András	Quantum mechanical calculation of reaction rate coefficients 	Dr. Fábrí Csaba	ELTE
8:40	Erdei Laura Csenge	$A F^- + PH_2I$ reakció dinamikájának modellezése saját fejlesztésű ab initio potenciálisenergia-felületen	Dr. Császár Attila Géza	SZTE
9:00	Gál Dorina Rebeka	$A Cl + CH_3X$ ($X = F, Cl, Br, I$) reakciók lehetséges útvonalainak nagypontosságú kvantumkémiai feltérképezése	Dr. Czakó Gábor	SZTE
9:20	Gyimesi Réka Sára	$A F^- + NH_2I$ reakció analitikus potenciálisenergia-felületének kifejlesztése és mechanizmusainak részletes vizsgálata	Dr. Papp Dóra	SZTE
9:40	Büfészünet		Dr. Czakó Gábor	
10:00	Haffner Ádám Balázs	Fémklaszter-katalizált szén-dioxid elektroredukciós folyamatok szimulációja	Dr. Papp Dóra	SZTE
10:20	Kígyósi Máté	Benchmarking ab initio protocols for high throughput cluster calculations 	Dr. Höltzl Tibor	BME
10:40	Rácsai Balázs	Regularized relativistic corrections for molecular systems 	Dr. Daru János	ELTE
11:00	Szabó András	Accelerating coupled cluster molecular dynamics of condensed phase aqueous systems using cluster-based delta-learning protocols 	Dr. Mátyus Edit	ELTE
			Dr. Daru János	ELTE
			Mészáros Bence Balázs	