

Elméleti kémia I.

2025. 04. 09. (szerda), LC.0.07

Zsűri

Elnök:	Dr. Hamza Andrea	<i>tudományos főmunkatárs</i>	HUN-REN
Tagok:	Dr. Vibók Ágnes	<i>egyetemi tanár</i>	DE
	Dr. Berta Dénes	<i>tudományos munkatárs</i>	BME

13:30	Fekete Csilla	Másodrendű kölcsönhatások vizsgálata organokatalizált foszfa-Michael-addícióban	Dr. Benkő Zoltán	BME
13:50	Gál Dorina Rebeka	$\text{Cl}^- + \text{NH}_2\text{I}$ reakció dinamikájának modellezése	Dr. Papp Dóra	SZTE
14:10	Gombás András	Pivot-invariant Knowles-partitioning at the multi-reference level 	Dr. Czakó Gábor	ELTE
14:30	Horváth Ádám	Diels–Alder cikloaddíciók számításhoz kémiai vizsgálata: Hogyan lehet egy lépésből több lépés?	Dr. Surján Péter	BME
14:50	Horváth Tamás	Radioaktív stroncium dekorporáció vizsgálata alkáliföldfém ionok komplexképződésének számítógépes analízisének keresztül	Dr. Benkő Zoltán	BME
15:10	Molnár Balázs József	A $\text{SiH}_3\text{I} + \text{F}^-$ reakció dinamikájának elméleti modellezése	Dr. Szőri Milán	ME
15:30	Büfészünet		Dr. Rózsa Zsófia Borbála	
15:50	Rudner Csaba	A $\text{C}_2\text{H}_5\text{I} + \text{Cl}$ reakció feltérképezése különböző kvantumkémiai módszerek segítségével	Dr. Czakó Gábor	SZTE
16:10	Szabó András	Reakciók minimum energia útvonalának optimalizálása gépi tanulás felhasználásával	Gruber Balázs	ELTE
16:30	Tar-Pálfi Helga	Hazai mutáns transztiretin tetramerizációjának vizsgálata in silico módszerekkel a jobb terápiás stratégiáért	Dr. Daru János	ELTE
			Mészáros Bence Balázs	
			Dr. Perczel András	ELTE
			Bódy István Levente	
			Fazekas Zsolt	