



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar

Oláh György Doktori Iskola

Pontos termokémiai számítások fejlesztése és alkalmazása

Tézisfüzet

Írta: Ganyecz Ádám

Témavezető: Dr. Csontos József

Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

MTA-BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport

2019

1. Bevezetés

A pontos termokémiai adatok nélkülözhetetlenek ahhoz, hogy megbízható előrejelzést adhassunk kémiai reakciókról, folyamatokról. Vegyi üzemek tervezése, a klímaváltozás modellezése, biológiai rendszerek analízise, csak hogy néhány példát említsek, elképzelhetetlen lenne a különféle adatbázisokban elérhető adatok nélkül.

Az utóbbi évtizedekben az elméleti módszerek jelentősége folyamatosan nőtt a termokémia területén. Pople és munkatársainak úttörő munkája óta hatalmas fejlődés tapasztalható a termokémiai mennyiségek elméleti meghatározásában. Számos ún. kompozit termokémiai modellt definiáltak különböző célok figyelembevételével, ideértve a Gaussian- n elméleteket¹, a CBS² (complete basis set) modelleket, a ccCA³ (correlation consistent composite approach), a Weizmann- n ⁴ és a HEAT⁵ protokollokat. Itt ugyancsak meg lehet említeni Allen és Császár focal-point analízisét⁶, valamint Feller, Peterson és Dixon (FPD) módszerét⁷, amelyek ugyan nem dolgoznak előre definiált receptekkel, de szorosan kapcsolódnak az előbb említett kompozit módszerekhez.

Ma már köztudott, hogy hogyan kell olyan kompozit modellt tervezni, amely képes különböző termokémiai mennyiségeket nagy pontossággal kiszámítani. Mivel az elektronkorreláció kezelése a legfontosabb, ezért a legpontosabb modellek a csatolt-klaszter (coupled-cluster, CC) módszert használják. Sajnos a CC számítások a rendszer méretével meredeken skálázódnak és sok bázisfüggvényt igényelnek, amik kis rendszerekre korlátozzák a termokémiai alkalmazhatóságot. Ugyancsak ismert, hogy a CC módszerek lassú konvergenciája explicit korrelációs módszerek alkalmazásával

¹J. Chem. Phys. 94(11), 7221 (1991); J. Chem. Phys. 109(18), 7764 (1998); J. Chem. Phys. 126(8), 084108 (2007)

²J. Chem. Phys. 89(4), 2193 (1988); J. Chem. Phys. 94(9), 6081 (1991); J. Chem. Phys. 94(9), 6091 (1991); J. Chem. Phys. 101(7), 5900 (1994); J. Chem. Phys. 104(7), 2598 (1996)

³J. Chem. Phys. 124(11), 114104 (2006); J. Chem. Phys. 125(10), 104111 (2006); J. Chem. Phys. 127(15), 154117 (2007)

⁴J. Chem. Phys. 111(5), 1843 (1999); J. Chem. Phys. 120(9), 4129 (2004)

⁵J. Chem. Phys. 121(23), 11599 (2004); J. Chem. Phys. 125(6), 064108 (2006); J. Chem. Phys. 128(11), 114111 (2008)

⁶J. Chem. Phys. 99(6), 4638 (1993); J. Chem. Phys. 108(23), 9751 (1998)

⁷Annu. Rep. Comput. Chem. 8, 1 (2012); Theor. Chem. Acc. 131(1), 1079 (2012)

gyorsítható⁸. Az utóbbi időben számos explicit korrelációs CC módszer vált elérhetővé, ami számos olyan kutatást hívott életre, amelyek az explicit módszerek termokémiai protokollokban történő alkalmazhatóságát vizsgálták. Jónéhány esetben az utóbbi idők kifinomult kompozit módszerei képesek akár olyan pontos adatokat is szolgáltatni, mint a legújabb kísérleti módszerek. Habár az ezekkel a módszerekkel vizsgálható rendszerek mérete korlátozott, a kísérleti módszerekkel nehezen, vagy egyáltalán nem hozzáférhető rövid élettartamú, illetve reaktív rendszerekhez sokszor az elméleti modellek nyújtják az egyetlen utat.

Ugyan számos termokémiai adatbázis létezik (JPL⁹, NIST-JANAF¹⁰, Burcat¹¹, CODATA¹², stb.), de ahogyan az adatok mennyisége növekszik, úgy válik nehezkesebbé az adatbázisok kezelése, értve ez alatt az adatok kritikus kiértékelését és naprakészen tartását. A legtöbb esetben nem csak egy adat áll rendelkezésre egy reakcióra, vagy egy termokémiai tulajdonságra. Ilyen esetekben a fenti adatbázisok, többnyire egyszerűen a legpontosabb értéket vagy a súlyozott átlagot kínálják a felhasználónak. Azonban ennek a kiválasztásnak megvannak a hátrányai, hogy csak egyet említsek, például egy pontos de nem precíz adat fennakadhat a rostán és elveszti befolyását a kérdéses mennyiség számolása során.

Egy másik helyénvalóbb megközelítés az eredmények termokémiai hálózatba (TN) való rendezése, amikor az összes adatot felhasználva szimultán határozzuk meg a kérdéses termokémiai mennyiségeket. Ilyenre példa Ruscic ATcT-je¹³ (Active Thermochemical Tables), valamint Császár és Furtenbacher NEAT-je¹⁴. Azonban a hálózatból kapott eredmények csak annyira jók, amennyire azt a bevitt adatok minősége megengedi. Azaz, továbbra is szükség van pontos kísérleti és/vagy elméleti termokémiai adatokra.

⁸Z. Phys. 54(5), 347 (1929); Theor. Chim. Acta 68(6), 445 (1985); Chem. Phys. Lett. 199(5), 497 (1992); J. Chem. Phys. 116(15), 6397 (2002); Chem. Phys. Lett. 398(1), 56 (2004)

⁹Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies

¹⁰NIST-JANAF Thermochemical Tables

¹¹<http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>

¹²CODATA Key Values for Thermodynamics

¹³<http://atct.anl.gov/>

¹⁴Chem. Eur. J. 16(16), 4826 (2010)

Az egyik terület, ahol az ilyen gyűjtemények kifejezetten hasznosak a légkörkémia. A klímaváltozás, amit nagy valószínűséggel az emberi tevékenység által termelt üvegházhatású gázok és ózontató anyagok okoznak, az egyik legfőbb kihívás a 21. században. Mivel a klórozott-fluorozott szénhidrogének (chlorofluorocarbon=CFC; hydrochlorofluorocarbon=HCFC) ózontató anyagok, ezért a Montréali egyezmény betiltotta használatukat, helyettesítésükre pedig fluorozott szénhidrogéneket (hydrofluorocarbon=HFC; perfluorocarbon=PFC) kezdtek alkalmazni a vegyiparban. Azonban ezeknek a fluorozott szénhidrogéneknek jóval nagyobb a hozzájárulásuk a globális felmelegedéshez, mint a lecserélt klórozott-fluorozott szénhidrogéneknek. Ennek következtében a HFC-eket és egyéb üvegházhatású gázok felhasználását a Kiotói egyezmény tárgyalja. Mivel a Kiotói egyezmény hamarosan érvényét veszti, 2020-ban lejár, a klímaváltozás mérséklésének érdekében a közelmúltban 196 ország írta alá a Párizsi egyezményt.

Ahhoz, hogy az ún. kémiai-éghajlat modellek segítségével tanulmányozhassuk és megérthessük az antropogén tevékenységek hatását, a légkör szempontjából fontos reakciókkal és vegyületekkel kapcsolatos pontos kinetikai és termokémiai adatok elengedhetetlenek. Mint már említettem számos adatbázis tartalmazza ezeket a lényeges információkat, azonban az adatok sokszor pontatlanok és ellentmondanak egymásnak. Ennek oka, hogy a troposzféra és sztratoszféra kémiája főként szabad gyökös reakciókból áll és ezek a nyílt héjú rendszerek kihívást jelentenek mind a kísérleti, mind az elméleti kutatásoknak. Mindazonáltal a nagy pontosságú számítások váltak a legfőbb eszközzé ezen anyagok vizsgálatára.

Meglepő módon a nukleobázisok is egy olyan molekulacsaládot alkotnak, amelyben termokémiai adatok viszonylag pontatlanok. A nukleobázisokkal kapcsolatos folyamatok pontos energiaviszonyaihoz, és ahhoz hogy jobban megértsük a szerkezet-tulajdonság kapcsolatokat a pontos termokémiai adatok elengedhetetlenek. A kívánalmak ellenére a kísérleti adatok ellentmondóak, különösen a szublimációs hő. Például adenin esetében a szublimációs entalpia kísérletileg mért értékei egy 30 kJ/mol-s tartományban szórnak. Nagy pontosságú gáz fázisú *ab initio* számítások segíthetnek

feloldani az ellentmondásokat, ha a szilárdfázisú képződéshők megbízhatóak. Azonban az égéshő értékek körül is van bizonytalanság, amiből a nukleobázisok képződéshője határozható meg.

Egyrészt a probléma az, hogy a nukleobázisok alacsony gőznyomása nehézkessé teszi a szublimációs hő mérését. Másrészt, az alkalmazott hőmérsékletkorrekció is problémás, hiszen a jelenlegi módszer egy empirikus illesztésen alapul. Mindez annak ellenére, így van, hogy manapság kvantumkémiailag módszerekkel könnyedén számolhatóak pontos hőkapacitás értékek.

A doktori munkám alatt két célt tartottam a szemem előtt. Egyrészt egy pontos termokémiai protokollt szerettem volna fejleszteni, illetve korábbi pontos módszereket akartam alkalmazni, mindezeket azért, hogy megbízható elméleti adatokat határozzak meg a fent említett molekulacsoportokra. Másrészt különféle termokémiai hálózatokat akartam létrehozni, hogy az elméleti eredményeimet kombináljam a már meglévő, megfelelően kiértékelt irodalmi adatokkal, hogy ezáltal (jelenlegi tudásunk alapján) a lehető legpontosabb és legmegbízhatóbb termokémiai mennyiségeket határozhassam meg.

2. Számítási módszerek

A fluorozott etilgyökök vizsgálatához egy HEAT-szerű protokollt, a diet-HEAT-t alkalmaztam¹⁵. Ez iteratív tartalmazza a háromszoros és perturbatív a négyszeres gerjesztéseket a CC elméletben, továbbá tartalmaz skalár relativisztikus és diagonális Born–Oppenheimer korrekciókat korreláció–konzisztens bázis halmazokon alapulva a következő egyenlet alapján:

$$E_{\text{TOT}} = E_{\text{HF}}^{\infty} + \Delta E_{\text{CCSD(T)}}^{\infty} + \Delta E_{\text{CCSDT}} + \Delta E_{\text{CCSDT(Q)}} + \Delta E_{\text{core}}^{\infty} + \Delta E_{\text{DBOC}} + \Delta E_{\text{Rel}} + \Delta E_{\text{ZPE}}.$$

A fenti protokoll explicit korrelációs változatát ugyancsak kifejlesztettem a munkám során, amit diet-HEAT-F12-nek neveztem el. A módszerek és báziskészletek úgy lettek kiválasztva, hogy az egyes járulékok a lehető legjobban visszaadják az eredeti HEAT-el kapott járulékokat; mindezt illesztett paraméterek nélkül. Ezt a protokollt végül fluorozott és klórozott metán- és etánszármazékokra, valamint nukleobázisokra alkalmaztam.

A kívánt termodinamikai függvények meghatározásához a statisztikus termodinamika szokásos egyenleteit használtam merev rotor-harmonikus oszcillátor modellben. A nagy amplitudójú mozgások harmonikus oszcillátor modellben okozott hibáját az egydimenziós gátolt rotor modell (1D-HR) segítségével korrigáltam¹⁶.

Ezután a termokémiai adatok pontosságát tovább finomítottam a termokémiai hálózat megközelítéssel. Ebben a rendszerben a standard reakcióhő 298 K-n, $\Delta_r H_{298}^{\circ}$, egy adott reakcióra a következőképpen írható fel:

$$\Delta_r H_{298}^{\circ}(i) = \sum_j^n \nu_{ij} \Delta_f H_{298}^{\circ}(j) + \epsilon(i).$$

$\Delta_r H_{298}^{\circ}(i)$ bizonytalansága $\epsilon(i)$, $\Delta_f H_{298}^{\circ}(j)$ pedig a j -ik molekula képződéshője 298 K-n, és ν_{ij} a megfelelő sztöchiometriai szám. Ez egy túlhatározott lineáris egyenletrendszer, ami felfogható egy többszörös lineáris regressziós problémaként. A megoldásához az iteratív újrásúlyozott legkisebb négyzetek módszerét alkalmaztam.

¹⁵J. Phys. Chem. A 114(50), 13093 (2010)

¹⁶J. Chem. Edu. 77(11), 1495 (2000); Theor. Chem. Acc. 118(5), 881 (2007)

3. Eredmények

Először a fluorozott etilgyököket vizsgáltam a diet-HEAT termokémiai protokollal, amivel a legmegbízhatóbb elméleti eredményeket kaptam a vizsgált 8 vegyületre. Ugyanis a diet-HEAT modell pontosabb volt, mint amiket korábban használtak, továbbá jól meghatározott hibahatárokat is hozzá lehetett rendelni az eredményekhez. A perturbatív háromszoros gerjesztéseken túli gerjesztések hatása figyelemre méltó volt, a CCSDT(Q) számolások hozzájárulása a képződéshöz a gyökök méretével, azaz a fluoratomok számával növekedett, és $\text{CF}_3\text{--CF}_2$ esetében érte el a maximumot, azaz 5 kJ/mol-t. A relativisztikus korrekciók hasonló trendet mutattak míg elérték a szintén 5 kJ/mol-s maximumukat $\text{CF}_3\text{--CF}_2$ esetében. Ezek alapján elkerülhetetlennek tartom a fenti két korrekciónak a figyelembe vételét, ha a cél a kémiai pontosság elérése. Azokban az esetekben ahol konformációs izoméria lépett fel, a Boltzmann-átlagolt termokémiai értékeket is meghatároztam. Korábbi vizsgálatok ugyan figyelembe vették a konformereket és megjósolták az energiasorrendjüket, azonban a termodinamikai mennyiségeket csak a legstabilabb izomerekre közölték. Ugyancsak meg kell említeni, hogy a $\text{CH}_2\text{F--CHF}$ egyik elrendeződése ugyan a HF/6-31G(d) módszerrel konformernek adódott, azonban magasabb szinten, MP2/cc-pVTZ és CCSD(T)/cc-pVTZ, azt találtam, hogy a feltételezett konformer mégsem minimum a potenciális energiafelszínen. Eredetileg $\text{CF}_3\text{--CH}_2$ és $\text{CF}_3\text{--CHF}$ esetében jelentős eltérés volt a számolás és kísérleti eredmények között, azonban a legújabb segédadatokkal újraszámolva a kísérleti eredményeket ez az ellentmondás feloldható volt. Ily módon a saját számolási eredményeim nem csak összhangba kerültek a legjobb kísérleti adatokkal, de azoknál kisebb bizonytalansággal rendelkeztek.

A következő munkámban kifejlesztettem egy hatékony és gazdaságos *ab initio* kompozit kémiai modellt, ami a diet-HEAT-F12 nevet kapta. A protokoll úgy lett összeállítva, hogy pontos termokémiai adatokat szolgáltatson legfeljebb harmadik periódusbeli atomokat tartalmazó vegyületekre. A tervezés során további elv volt, hogy paramétermentes legyen, azaz sem kísérleti, sem elméleti adatokat nem használtam,

hogy skálázó faktort vagy extrapolációs együtthatót illesszek. Fontos továbbá, hogy a fejlesztés során nem vettem hasznát kísérleti adatoknak, azaz a megfelelő komponensek kiválasztásához kizárólag nagy pontosságú elméleti számításokat használtam. Az elkészült modell 95%-os konfidenciaintervalluma a referenciának használt HEAT értékekhez viszonyítva 0.5 kcal/mol volt. Azt is bemutattam, hogy egy pontos atomizációs energiákat tartalmazó független adatbázishoz viszonyítva a diet-HEAT-F12 protokoll adja a legpontosabb eredményeket a hasonló kémiai modellekhez képest.

Ezt követően 50 légkörkémiában releváns vegyület, köztük különféle klórozott és fluorozott metán és etánszármazékok, képződéshőjét határoztam meg a diet-HEAT-F12 protokoll és egy termokémiai hálózat segítségével. Az 50-ből 28 esetben a munkám adta a legmegbízhatóbb képződéshő eredményeket. A többi esetben a kapott eredmények összhangban voltak az ATcT és JPL legpontosabb adataival, kivéve a $\text{CF}_3\text{-CF}_3$, CF_3 , CHF_3 és CH_2F_2 molekulákat, amikor ugyan kis eltérésekkel, de a hibahatárok nem fedtek át. A legnagyobb eltérés, 0,5 kJ/mol, $\Delta_f H_{298}^\circ(\text{CHF}_3)$ esetében volt tapasztalható. A hálózat elemzéséhez jól ismert statisztikai mennyiségeket használtam, ugymint a DFBETA és SDFBETA mutatókat, valamint a reziduumokat. Ezen mennyiségek alapján további vegyületeket találtunk, CF_4 , CH_3Cl , CHCl_3 , CCl_4 , CFCl_3 , CF_2Cl_2 , amelyek termokémiai tulajdonságai további vizsgálatokat igényelnek. A munka során azt tapasztaltam, hogy a hagyományos CCSD(T) számolások még 5Z bázis esetén is szenvedhetnek báziskészlet szuperpozíciós hibától, míg az explicit korrelációs módszerek mentesek ettől a hibától. Ezért a diet-HEAT-F12 kémiai modell használata javasolt a hagyományos diet-HEAT helyett. Vizsgáltam továbbá, hogy a termokémiai hálózatba kerülő elméleti számítások minősége hogyan befolyásolja az eredményeket. Azt tapasztaltam, hogy a rossz minőségű számolási eredmények aláássák a termokémiai hálózat előnyeit. Természetesen ez a jelenség leginkább akkor jelentkezik, amikor nincs pontos elméleti vagy kísérleti eredmény ami mérsékelni tudná a pontatlan számolás hatását.

Doktori munkám utolsó részében uracil, timin, citozin és adenin nukleobázisok képződéshőit és szublimációs entalpiáit határoztam meg. Egyrészt a diet-HEAT-

F12 protokollt alkalmaztam, hogy pontos elméleti $\Delta_f H_{298}^\circ(\text{g})$ értékeket kapjak, figyelembe véve a citozin különféle tautomereit és a timin nagy amplitudójú mozgását. Másrészt az elérhető éghő és szublimációs adatokat átnéztem és újraszámoltam pontos elméleti hőkapacitás értékekkel. A kísérleti adatokat és a diet-HEAT-F12 eredményeket egy termokémiai hálózatba rendeztem, ami a legjobb eredményeket szolgáltatja a vizsgált termokémiai mennyiségek tekintetében. Ugyan uracil, timin és citozin esetében az eredmények összhangban vannak a legpontosabbnak vélt adatokkal, azonban az elemzésem rámutat arra, hogy az előzőleg közölt hibahatárok túlságosan optimisták. Adenin esetében az elérhető adatok nem konzisztensek az eredményeimmel. Ennek az lehet az oka, hogy a különböző mintaelőkészítési módok eltérő kristályfokú mintát eredményeznek. Azonban ennek további vizsgálata egy következő munka tárgya kell, hogy legyen. Oldási szabadentalpiákat is vizsgáltam különböző módszerekkel és a kísérleti eredményekből levezetett adatokhoz viszonyítottam az eredményeimet. Timin, citozin és adenin esetében a legjobb becsléseket az oldási szabadentalpiákra a munkám szolgáltatja.

4. Alkalmazási lehetőségek

A diet-HEAT-F12 kémiai modellt már doktori munkám során is alkalmaztam különböző halogénezett vegyületek és nukleobázisok képződéshőjének meghatározására, és további hasonló közepes méretű molekulára is általánosan alkalmazható. A munka során kapott eredmények referenciaértékként is felhasználhatóak, például újabb módszerek fejlesztése során.

5. Tézisek

- I Az eredmények alapján a CCSDT(Q) és relativisztikus járulékok nagysága, külön-külön is, eléri az 5 kJ/mol-t — akár 7 atomos rendszerek esetén is. Mivel ezt fluorozott etilgyökökre és nukleobázisokra is megfigyeltem, ez alapján általánosan kijelenthető, hogy a kémiai pontosság elérésének érdekében szükséges ezeknek a számításoknak az elvégzése.[1,4]
- II Kifejlesztettem a diet-HEAT-F12 nevű paramétermentes *ab initio* kompozit kémiai modellt, melynek célja legfeljebb harmadik periódusbeli atomokat tartalmazó molekulák termokémiai adatainak pontos meghatározása. A modell teljesítménye jobb, mint a hasonló, azonban paraméterezett, explicit korrelációs elméleti kémiai modelleké. Továbbá a 95%-os konfidenciaintervallum megadásához szükséges egyenletet is meghatároztam.[2]
- III A termokémiai hálózatba illesztett elméleti számítások minőségének és megbízhatóságának vizsgálata alapján megállapítható, hogy a 8 kJ/mol-nál nagyobb bizonytalansággal rendelkező elméleti számítások hibáit nem tudja kompenzálni a termokémiai hálózatok módszere és megbízhatatlan megoldást ad.[3]
- IV A diet-HEAT-F12 protokoll és a termokémiai hálózat megközelítés segítségével az 50 vizsgált fluozott és klórozott metán- és etánszármazék közül 28 esetben az általam meghatározott képződéshő a legmegbízhatóbb érték. Továbbá a diet-HEAT-F12 számolásokkal kapott eredmények 50-ből 46 esetben összhangban vannak a hálózatból kapott eredményekkel, azaz a diet-HEAT-F12 eredmények önmagukban egy paramétermentes konzisztens adatsort adnak.[3]
- V A diet-HEAT-F12 számításokkal és termokémia hálózat alkalmazásával uracil, timin és citozin esetében a legmegbízhatóbb képződéshő értékeket állapítottam meg. Adenin esetében a kísérleti adatok közötti ellentmondás miatt a diet-HEAT-F12 eredményünket javasolom.[4]

6. Közlemények és előadások

6.1. A disszertációval kapcsolatos közlemények

- 1 Accurate Theoretical Thermochemistry for Fluoroethyl Radicals,
Á. Ganyecz, M. Kállay, and J. Csontos,
J. Phys. Chem. A, **2017**, 121:1153
DOI: 10.1021/acs.jpca.6b12404, IF: 2.836, hivatkozások: 3
- 2 Moderate-Cost *Ab Initio* Thermochemistry with Chemical Accuracy,
Á. Ganyecz, M. Kállay, and J. Csontos,
J. Chem. Theory Comput., **2017**, 13:4193
DOI: 10.1021/acs.jctc.7b00607, IF: 5.399 , hivatkozások: 6
- 3 High Accuracy Quantum Chemical and Thermochemical Network Data for the Heats of Formation of Fluorinated and Chlorinated Methanes and Ethanes,
Á. Ganyecz, M. Kállay, and J. Csontos,
J. Phys. Chem. A, **2018**, 122:5993
DOI: 10.1021/acs.jpca.8b00614, IF: 2.836, hivatkozások: 5
- 4 Thermochemistry of Uracil, Thymine, Cytosine, and Adenine,
Á. Ganyecz, M. Kállay, and J. Csontos,
J. Phys. Chem. A, **2019**, 123:4057
DOI: 10.1021/acs.jpca.9b02061, IF: 2.836, hivatkozások: 0

6.2. Egyéb közlemények

- Theoretical and Thermochemical Network Approaches To Determine the Heats of Formation for HO₂ and Its Ionic Counterparts,
Á. Ganyecz, J. Csontos, B. Nagy, and M. Kállay
J. Phys. Chem. A, **2015**, 119:1164
DOI: 10.1021/jp5104643, IF: 2.836, hivatkozások: 6

- Oxygen reduction reaction on TiO₂ rutile (110) surface in the presence of bridging hydroxyl groups,
 Á. Ganyecz, P. D. Mezei, and M. Kállay
Comput. Theor. Chem., **2019**, 1168:112607
 DOI: 10.1016/j.comptc.2019.112607, IF: 1.344 , hivatkozások: 0
- Synthesis and characterization of isophorondiamine-based oligoamides: catalytic effect of amides during the curing of epoxy resins,
 L. Kárpáti, Á. Ganyecz, T. Nagy, G. Hamar, E. Banka, M. Kállay, and V. Vargha
Polym. Bull., **2019**
 DOI: 10.1007/s00289-019-02987-6, IF: 1.858, hivatkozások: 0

6.3. Előadások

- Előadás: **XXXVIII. Kémiai Előadó Napok**, 2015, Szeged, Magyarország
 Pontos termokémiai számítások fluorozott etilgyökökre, Á. Ganyecz, J. Csontos, and M. Kállay
- Előadás: **Innováció a Természettudományban - Doktorandusz konferencia**, 2015, Szeged, Magyarország
 Aktív termokémiai táblázatok- a kvantumkémiai számítások szerepe, Á. Ganyecz, J. Csontos, and M. Kállay
- Poszter: **Magical Mystery Tour of Electron Correlation in Honour of Jeppe Olsen on the Occasion of his 60th Birthday**, 2016, Oslo, Norvégia
 Thermochemistry of fluoroethyl radicals, Á. Ganyecz, J. Csontos, and M. Kállay
- Előadás: **Graduate Conference on Theoretical Chemistry 2016**, 2016, Keszthely, Magyarország
 High-Accuracy Thermochemistry of Fluoroethane Radicals, Á. Ganyecz, J. Csontos, and M. Kállay

- Poszter: **16th International Congress of Quantum Chemistry**, 2018, Menton, Franciaország
Accurate Theoretical Thermochemistry of Nucleobases, Á. Ganyecz, J. Csontos, and M. Kállay
- Poszter: **9th Molecular Quantum Mechanics Conference**, 2019, Heidelberg, Németország
Thermochemistry of Uracil, Thymine, Cytosine, and Adenine, Á. Ganyecz, J. Csontos, and M. Kállay