

DOKTORI (PH.D.) ÉRTEKEZÉS TÉZISEI

Tasi Domonkos Attila

**Összetett ionok S_N2 reakcióinak *ab initio*
feltérképezése és dinamikai vizsgálata**

Témavezető:

Dr. Czakó Gábor

egyetemi docens, az MTA doktora



**Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
Kémia Doktori Iskola**

**MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika
Kutatócsoport**

Szeged

2023

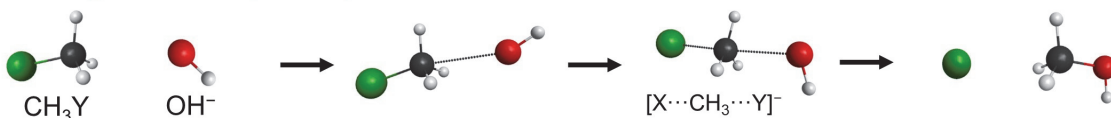
1 Bevezetés és célkitűzés

A bimolekuláris nukleofil szubsztitúció (S_N2) az egyik legalapvetőbb kémiai reakció, amelyet gázfázisban kísérleti és elméleti módszerekkel is mélyrehatóan vizsgálnak. Egy $X^- + CH_3Y \rightarrow CH_3X + Y^-$ S_N2 mintareakció esetében, a hagyományos Walden-inverzió egy pentakovalens $[X \cdots CH_3 \cdots Y]^-$ átmeneti állapoton megy keresztül, ami összekapcsol egy reaktánszerű és egy termékszerű ion-dipólus vagy hidrogénkötéses komplexet. Inverzió mellett, retenció is végbemehet két különböző mechanizmus szerint. Míg az előlről támadás egy magasabb energiájú $[XYCH_3]^-$ átmeneti állapoton halad keresztül, addig a Szabó és Czákó által felfedezett dupla-inverziós mechanizmus egy alacsonyabb energiájú útvonalon keresztül megy végbe. Ezen mechanizmus során az első lépés egy protonabsztrakció által indukált inverzió az $[XH \cdots CH_2Y]^-$ átmeneti állapoton át, amelyet a szokásos Walden-inverzió követ. A 2010-es évekre nyilvánvaló vált, hogy az S_N2 reakcióról alkotott kép jóval összetettebb, mint azt azelőtt gondolták. A hagyományos Walden-inverzió számos direkt és indirekt mechanizmuson keresztül lejátszódhat a reakció körülményeitől és a reaktánsoktól függően (1. ábra), mint például: ion-dipólusos komplexképződés, körüljárásos mechanizmus, lehasításos mechanizmus stb. S_N2 mellett, protonabsztrakció is végbemehet, ami a $CH_2Y^- + HX$ termékek képződéséhez vezet. Továbbá, a $X^- + CH_3(CH_2)_nY$ [$n = 1, 2, \dots$] reakciók esetében, a bimolekuláris elimináció (E2) lejátszódása is lehetséges, ami a $Y^- + HX + C_{n+1}H_{2n+2}$ termékeket eredményezi.

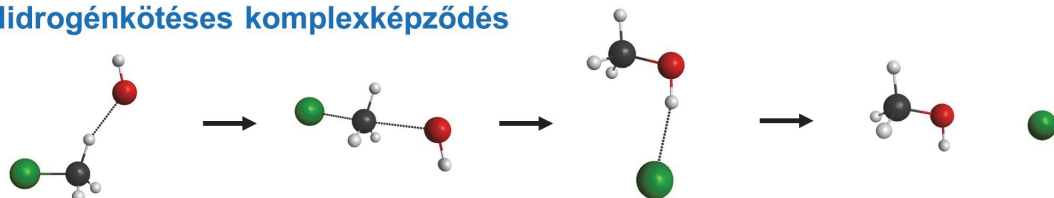
A kémiai reakciók dinamikájának elméleti tanulmányozásának egyik legelterjedtebb eszköze a kvázi-klasszikus trajektória (*quasi-classical trajectory*, QCT) módszer. A direkt dinamikai szimulációk során a potenciális energiát és a gradienst egy elektronszerkezet-számító program segítségével kapjuk meg menet közben, így a magas számításigény miatt, csupán kevésbé megbízható, alacsonyabb szintű módszerek alkalmazhatóak. Ezzel szemben, a reakció potenciálisenergia-felülete (*potential energy surface*, PES) reprezentálható egy analitikus függvénnyel, ami a szükséges számításokat hatékonyabbá teszi. Vagyis, ebben az esetben a fő cél az, hogy minél pontosabb PES-t fejlesszünk. Ennek érdekében, Győri és Czákó elkészítették a ROBOSURFER programcsomagot, mely lehetővé teszi egy kémiai reakció PES-ének automatizált fejlesztését. Azóta, ezen program felhasználásával, számos reakció PES-e elkészült: $Cl + C_2H_6$, $F^- + CH_3Br$, $F^- + NH_2Cl$, $F^- + CH_3CH_2Cl$, $OH + C_2H_6$ stb.

Walden-inverziós útvonalak

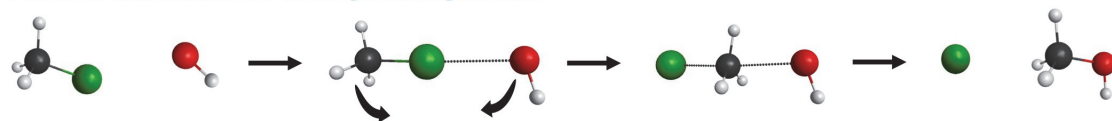
Ion-dipólus komplexképződés



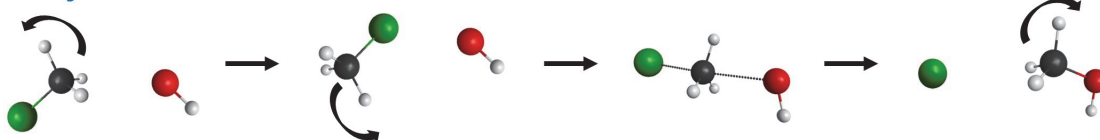
Hidrogénkötéses komplexképződés



Előlről-támadásos komplexképződés



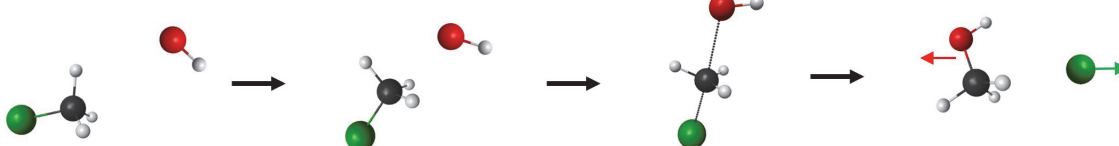
Körüljárásos mechanizmus



Visszaszóródásos mechanizmus

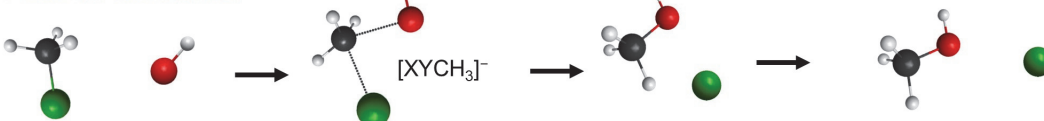


Lehasításos mechanizmus

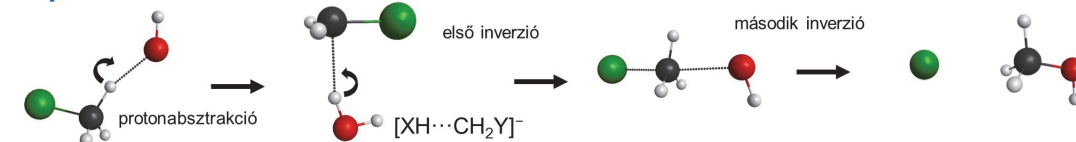


Retenciós útvonalak

Előlről támadás



Dupla inverzió



kék: indirekt piros: direkt

1. ábra A lehetséges direkt és indirekt mechanizmustípusok a $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{Y}$ [$\text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ és I] $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók esetében, feltüntetve a Walden-inverzió, előlről támadás és dupla inverzió átmeneti állapotainak szerkezetét.

Tovább lépve a halogenidionok és metil-halogenidek között lejátszódó szokványos hatatomos S_N2 reakciókon, a két- és háromatomos nukleofilek reakcióinak a vizsgálata a soron következő kihívás. Így, a doktori munkám középpontjában a OH^- , CN^- , SH^- , NH_2^- és PH_2^- metil-halogenidekkel történő S_N2 reakciók vizsgálata állt. Munkám egyik fő célja a reakciók stacionárius pontjainak a feltérképezése volt, különös tekintettel a korábban nem vizsgált dupla-inverziós és előlről-támadásos mechanizmusokra. A hidroxidion esetében, az etil-halogenidekkel való reakciókat is górcső alá terveztük venni. A felsorolt reakciók közül a leginkább tanulmányozott a $OH^- + CH_3Y$: Hase és mtsai. direkt dinamikai szimulációkat végeztek a $OH^- + CH_3F$ reakcióra és kimutatták, hogy a reakció elkerüli a kimeneti csatornában található hidrogénkötéses $CH_3OH \cdots F^-$ mély minimumot. Ugyancsak fontos megemlíteni a $OH^- + CH_3I$ reakció dinamikai vizsgálatát, mely esetében, a direkt dinamikai szimulációkat kiegészítve, Wester és mtsai. keresztezett molekulasugár, illetve az azzal kombinált sebességtérkép képfeldolgozásának módszerét alkalmazták. Ezen eredmények motiváltak arra, hogy nagy pontosságú analitikus, globális PES-eket fejlesszünk a $OH^- + CH_3F/CH_3I$ reakciók esetében, annak érdekében, hogy a reakciók dinamikáját a QCT módszer segítségével megvizsgáljuk. További célként tűztük ki a poliatom + poliatom típusú, $NH_2^- + CH_3I$ S_N2 reakció első részletes dinamikai jellemzését is.

2 Módszerek

A stacionárius pontok energiáit, geometriáit és vibrációs frekvenciáit a MOLPRO programcsomaggal, míg a poszt-CCSD(T) effektusokat pedig az MRCC programmal határoztuk meg a MOLPRO-n keresztül. A szerkezeteket és frekvenciákat a CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVTZ elméleti szinten számítottuk, majd ezen szerkezeteken az energiákat pedig a CCSD(T)-F12b módszerrel aug-cc-pVQZ bázison határoztuk meg. A $OH^- + CH_3Y$ reakciónál, a poszt-CCSD(T) és a törzselektron-korrelációt is kiszámítottuk, ezen felül, a $CN^- + CH_3Y$ esetében még a relativisztikus effektusokat is figyelembe vettük. A Br és a I atomoknál relativisztikus törzselektron potenciálokat alkalmaztunk és az ezeknek megfelelő báziskészleteket használtuk. A $OH^- + CH_3F/CH_3I$ és az $NH_2^- + CH_3I$ PES fejlesztése során a ROBOSURFER programot alkalmaztuk a MOLPRO-val együtt, és a QCT szimulációkat a csoportunkban kifejlesztett programokkal végeztük el. A QCT eredmények kiértékeléséhez az általam írt FORTRAN 90 és AWK programokat használtuk.

3 Eredmények

Az $X^- + CH_3Y$ S_N2 reakciók [$X = OH^-, CN^-, SH^-, NH_2^-$ és PH_2^- , $Y = F, Cl, Br$ és I] és a $OH^- + CH_3CH_2Y$ [$Y = F, Cl, Br$ és I] S_N2 és $E2$ reakciók stacionárius pontjainak feltérképezése (T1–T3)

T1. Összehasonlítottuk nagy pontosságú *ab initio* módszerek segítségével a $OH^- + CH_3Y$ és a $OH^- + CH_3CH_2Y$ [$Y = F, Cl, Br, I$] reakciókat, és az energiadiagramok alapján megállapítottuk, hogy a megfelelő reakciók S_N2 csatornái jelentősen hasonlóak.

Mindkét reakciótípust a reaktánsokhoz képest energetikailag mélyebben elhelyezkedő Walden-inverziós útvonal, illetve retencióval járó alacsony energiájú dupla-inverziós útvonal jellemzi, továbbá CH_3I esetén, stabil előlről-támadásos komplexképződés azonosítható. Ugyancsak megállapítottuk, hogy a $OH^- + CH_3CH_2Y$ reakció S_N2 csatornája termodinamikailag kedvezőbb minden esetben, mint a megfelelő $E2$, azonban figyelembe véve a zérusponti energiákat, az anti- $E2$ útvonal válik kinetikailag kedvezőbbé. Kiemelendő, hogy a $OH^- + CH_3Y$ reakcióknál figyelembe vettük a poszt-CCSD(T) effektusokat és a törzselektronok korrelációjának hatását is. Továbbá, a $OH^- + CH_3CH_2Y$ esetekben, számos más lehetséges csatorna entalpiáját is meghatároztuk, és a számított értékeink a „kísérleti” termokémiai adatbázisból (*Active Thermochemical Tables*) nyert eredményekkel kiváló egyezést mutattak.

T2. Az ambidens CN^- és metil-halogenidek közötti S_N2 reakciók nagy pontosságú feltérképezése alapján megállapítottuk, hogy a C–C-kötést kialakító S_N2 reakciók lejátszódása termodinamikailag kedvezőbb, mint a C–N kötésé, ugyanakkor kinetikai szempontból az előny kevésbé jelentős.

A cianidionnak két reaktív centruma van, ezért $CN^- + CH_3Y$ esetén, két lehetséges reakcióút van a CH_3CN vagy CH_3NC termékek felé. Ellentétben a $OH^- + CH_3Y/CH_3CH_2Y$ S_N2 reakciókkal, a dupla inverzió és az előlről támadás is, egy magasabb energiájú útvonal mentén megy végbe. Habár, hasonlóan az utóbbi S_N2 reakciókhoz, számos hidrogénkötéses, halogénkötéses és ion-dipólusos komplex fellelhető a bemeneti és a kimeneti csatornában, melyek hatást gyakorolhatnak a reakció dinamikájára. Továbbá, munkánk során, más nem S_N2 reakciók entalpiáját is meghatároztuk, melyek mind endotermnek bizonyultak.

T3. A $\text{SH}^-/\text{NH}_2^-/\text{PH}_2^- + \text{CH}_3\text{Y}$ $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók nagy pontosságú *ab initio* jellemzése igazolja, hogy jelentős hasonlóság figyelhető meg az azonos távozó csoporttal rendelkező $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók között.

A vizsgált $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók közül, a legexotermebb az $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$, míg az egyedüli endoterm a $\text{SH}^- + \text{CH}_3\text{F}$. A $\text{OH}^-/\text{NH}_2^-/\text{PH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$ és az $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{Br}$ esetekben, a hagyományos Walden-inverziós átmeneti állapot helyett, egy reaktánsjellegű átmeneti állapot figyelhető meg a bemeneti csatornában. Ami a retenciós útvonalakat illeti, általában a dupla-inverziós átmeneti állapot alacsonyabb energiájú, mint az előlről támadásos, ráadásul az $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{Y}$ [$\text{Y} = \text{Cl}, \text{Br}$ and I] és a $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakcióknál, a dupla inverzió gátja el is tűnik.

A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}/\text{CH}_3\text{I}$ és $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakciók dinamikájának QCT tanulmányozása (T4–T7)

T4. A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció esetén, számos PES-t fejlesztettünk különböző elméleti szinteken a ROBOSURFER programcsomag segítségével, annak érdekében, hogy megállapítsuk melyik a legalkalmasabb *ab initio* módszer a PES fejlesztésére.

A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}/\text{CH}_3\text{I}$ és az $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakciókra globális, analitikus PES-eket fejlesztettünk a ROBOSURFER programcsomag segítségével. A fejlesztés eljárását a $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakcióra dolgoztuk ki, majd hasonló elvet alkalmaztunk a $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}$ és $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakciókra is. A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ esetén, számos *ab initio* módszert vizsgáltunk, és nyolc különböző PES-t fejlesztettünk, hogy felmérjük a különböző elméleti szintek hatását a reakció dinamikájára. Eredményül arra a következtetésre jutottunk, hogy egy kompozit, a Brueckner-féle csatolt klaszter elven alapuló *ab initio* módszer a legmegfelelőbb a PES fejlesztésére.

Ahhoz, hogy részletesebb képet kapjunk a $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}/\text{CH}_3\text{I}$ és az $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakciókról, feltérképeztük a protonabsztrakciós csatornák stacionárius pontjait is nagy pontosságú *ab initio* módszerek segítségével. Annak érdekében, hogy részletes dinamikai leírást tudjunk nyújtani a reakcióról, QCT szimulációkat futtattunk a megfelelő PES-eken különböző ütközési energiákon.

T5. A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ QCT módszerrel történő dinamikai vizsgálata a kísérleti eredményekkel jó egyezést mutatott. A protonabsztrakció esetében a direkt lehasításos mechanizmus a meghatározó, míg az $\text{S}_{\text{N}}2$ csatorna esetében inkább indirekt jelleg állapítható meg.

A keresztezett molekulásugár kísérleti eredményeket felhasználva, egy átfogó elméleti–kísérleti tanulmányt ismertettünk a $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció dinamikájáról. Dinamikai szimulációink 11 különböző reakciócsatornát tártak fel, és kísérletileg 3 termékion volt detektálható (I^- , CH_2I^- és $[\text{I}\cdots\text{H}_2\text{O}]^-/[\text{I}\cdots\text{OH}]^-$). A termékek képződéseinek arányában, a szórási szögeknek, illetve a belső energiáinak eloszlásában jó egyezés tapasztalható a számított QCT és a kísérleti értékek között. A korábban közölt direkt dinamikai eredmények összhangban vannak a számításainkkal, azonban a mi QCT szimulációink sokkal jobb egyezést mutatnak a kísérlettel, ezáltal részletesebb betekintést tudunk nyújtani a $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció dinamikájába.

T6. A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}$ reakció vizsgálata során közel 1 millió QCT számítást végeztünk számos különböző ütközési energián és szimulációink felfedtek egy új exoterm oxidion szubsztitúciós reakcióutat, amely a nemvárt HF és CH_3O^- termékekhez vezet.

Ezen úgynevezett oxidion szubsztitúció során, először, a hagyományos Walden-inverzió megy végbe, majd a rendszer a $\text{CH}_3\text{OH}\cdots\text{F}^-$ minimumban megreked, ahol egy idő után a fluoridion leszakítja a CH_3OH hidroxilcsoportjának a protonját. Megmutattuk, hogy ez a szokatlan útvonal elsősorban alacsony ütközési energiákon játszódik le, mivel az $\text{S}_{\text{N}}2$ csatorna direkt karaktere egyre meghatározóbb magasabb ütközési energiákon, így egyre valószínűbb, hogy a reakció elkerüli a hidrogénkötéses mély globális minimumot. A $\text{CH}_3\text{OH}\cdots\text{F}^-$ komplex jelentőségének pontosabb megértése érdekében elkülönítettük azokat az $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciókat, melyek ezen mély minimumon mennek keresztül, továbbá bizonyos esetekben még meghatároztuk ezen komplex élettartamát is. A részletes dinamikai vizsgálat keretein belül, az összes lehetséges útvonalat azonosítottuk és kiszámítottuk azok hatáskeresztmetszeteit, valamint vizsgáltuk az $\text{S}_{\text{N}}2$, a protonabsztrakció és az oxidion szubsztitúció termékeinek belső és relatív translációs energiáinak, illetve szórási szögeknek eloszlásait is. Ezen új oxidion szubsztitúció jelentőségét tovább növeli, hogy hasonló protonátadási folyamatok előfordulhatnak más reakciók kimeneti csatornájában is. A legígéretesebb eset a $\text{SH}^- + \text{CH}_3\text{F}$ reakció, ahol a megfelelő szulfidion szubsztitúció termodinamikailag kedvezőbb, mint az $\text{S}_{\text{N}}2$.

T7. Elsőként végeztük el a nyolcatomos $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció nagy pontosságú vizsgálatát, amely felderített két új retenciós útvonalat az $\text{S}_{\text{N}}2$ csatorna esetében.

QCT szimulációink felfedték, hogy ahogy az ütközési energia nő, úgy válik egyre dominánsabbá az $\text{S}_{\text{N}}2$ csatorna indirekt karaktere elősegítve így a rezgésileg gerjesztett $[\text{CH}_3 \cdots \text{NH}_2]$ komplexek képződését. Ezen komplexekben a CH_3 csoport forgása megengedett, ami lehetővé teszi két új, szokatlan $\text{S}_{\text{N}}2$ retenciós útvonal lejátszódását. Kiemelendő, hogy ezen rendhagyó csatornák a leggyakoribb $\text{S}_{\text{N}}2$ retenciós útvonalak a $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció esetén. Továbbá, ellentétben a $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}/\text{CH}_3\text{I}$ reakciókkal, $\text{S}_{\text{N}}2$ és protonabsztrakció mellett, jelentős jó-dabsztrakció is megfigyelhető, ami a $\text{CH}_3 + [\text{NH}_2 \cdots \text{I}]^-$ termékeket eredményezi.

4 A dolgozat alapját képező publikációk

MTMT (Magyar Tudományos Művek Tára) azonosító: 10062677

1. **D. A. Tasi***, T. Michaelson, R. Wester, G. Czakó*: *Quasi-classical trajectory study of the $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reaction: Theory meets experiment.* Phys. Chem. Chem. Phys., 25, 4005, 2023, IF: 3,945
2. **D. A. Tasi***, G. Czakó*: *Unconventional $\text{S}_{\text{N}}2$ retention pathways induced by complex formation: High-level dynamics investigation of the $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$ polyatomic reaction.* J. Chem. Phys., 156, 184306, 2022, IF: 4,304
3. Z. Kerekes, **D. A. Tasi**, G. Czakó*: *$\text{S}_{\text{N}}2$ reactions with an ambident nucleophile: A benchmark ab initio study of the $\text{CN}^- + \text{CH}_3\text{Y}$ [$\text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$] systems.* J. Phys. Chem. A, 126, 889, 2022, IF: 2,944
4. **D. A. Tasi***, G. Czakó*: *Uncovering an oxide ion substitution for the $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}$ reaction.* Chem. Sci., 12, 14369, 2021, IF: 9,969
5. **D. A. Tasi***, C. Tokaji, G. Czakó*: *A benchmark ab initio study of the complex potential energy surfaces of the $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Y}$ [$\text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$] reactions.* Phys. Chem. Chem. Phys., 23, 13526, 2021, IF: 3,945
6. G. Czakó*, T. Györi, D. Papp, V. Tajti, **D. A. Tasi**: *First-principles reaction dynamics beyond six-atom systems.* J. Phys. Chem. A, 125, 2385, 2021, IF: 2,944
7. **D. A. Tasi**, T. Györi, G. Czakó*: *On the development of a gold-standard potential energy surface for the $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reaction.* Phys. Chem. Chem. Phys., 22, 3775, 2020, IF: 3,676
8. **D. A. Tasi**, Z. Fábrián, G. Czakó*: *Rethinking the $\text{X}^- + \text{CH}_3\text{Y}$ [$\text{X} = \text{OH}, \text{SH}, \text{CN}, \text{NH}_2, \text{PH}_2$; $\text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$] $\text{S}_{\text{N}}2$ reactions.* Phys. Chem. Chem. Phys., 21, 7921, 2019, IF: 3,430
9. **D. A. Tasi**, Z. Fábrián, G. Czakó*: *Benchmark ab initio characterization of the inversion and retention pathways of the $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{Y}$ [$\text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$] $\text{S}_{\text{N}}2$ reactions.* J. Phys. Chem. A, 122, 5773, 2018, IF: 2,641

Σ IF = 37,798

5 További publikációk

1. G. Czakó*, T. Győri, B. Olasz, D. Papp, I. Szabó, V. Tajti, **D. A. Tasi**: *Benchmark ab initio and dynamical characterization of the stationary points of reactive atom + alkane and S_N2 potential energy surfaces*. Phys. Chem. Chem. Phys., 22, 4298, 2020, IF: 3,676
2. **D. A. Tasi***, J. Csontos, B. Nagy, Z. Kónya, G. Tasi: *Comment on “Causation or only correlation? Application of causal inference graphs for evaluating causality in nano-QSAR models” An alternative interpretation of toxicity of metal oxide nanoparticles towards bacteria Escherichia Coli*. Nanoscale, 10, 20863, 2018, IF: 6,970

$$\frac{\sum \text{IF} = 10,646}{\sum \sum \text{IF} = 48,444}$$

6 Konferencia-előadások és poszterek

1. T. Győri, **D. A. Tasi**, V. Tajti, D. Papp, G. Czakó: *Towards automated potential energy surface development with Robosurfer and ManyHF*. Mátrafüred, MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság Ülése. 2022.10.22.
2. **D. A. Tasi**, G. Czakó: *Dynamics of the $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}$ reaction: The oxide ion substitution*. Balatonföldvár, XVI. International Workshop on Quantum Reactive Scattering, 2022.09.08.
3. T. Győri, **D. A. Tasi**, V. Tajti, D. Papp, G. Czakó: *Tools for automated PES development: Robosurfer and ManyHF*, Balatonföldvár, XVI. International Workshop on Quantum Reactive Scattering, 2022.09.05.
4. T. Győri, **D. A. Tasi**, V. Tajti, D. Papp, G. Czakó: *Towards automated potential energy surface development with Robosurfer and ManyHF*. Stonehill College, Easton, MA, USA, Molecular Interactions and Dynamics – Gordon Research Conference, 2022.07.12. (poszter)
5. T. Győri, **D. A. Tasi**, V. Tajti, D. Papp, G. Czakó: *Towards automated potential energy surface development with Robosurfer and ManyHF*. Stonehill College, Easton, MA, USA, Molecular Interactions and Dynamics – Gordon Research Conference, 2022.07.12.

6. **Tasi D. A.**, Czakó G.: *Rendhagyó reakcióút $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}$ esetén: az oxidion szubsztitúció.* Szeged, KeMoMo-QSAR Szimpózium, 2022.06.02.
7. **Tasi D. A.**, Czakó G.: *A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{F}$ reakció dinamikai vizsgálata: az oxidion szubsztitúció.* Online, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági ülés, 2021.10.20.
8. **Tasi D. A.**, Czakó G.: *Poliatom-poliatom típusú $\text{S}_{\text{N}}2$ reakció dinamikájának vizsgálata: az $\text{NH}_2^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció esete.* Online, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági ülés, 2021.05.27.
9. **Tasi D. A.**, Czakó G.: *A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció potenciálisenergia-felületének fejlesztése és dinamikája különböző kvantumkémiai szinteken.* Mátrafüred, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági ülés, 2019.11.07.
10. **Tasi D. A.**, Czakó G.: *A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció potenciálisenergia-felületének fejlesztése különböző kvantumkémiai szinteken.* Szeged, XLII. Kémiai Előadói Napok, 2019.10.30.
11. **D. A. Tasi**, G. Czakó: *Rethinking fundamental $\text{S}_{\text{N}}2$ reactions.* XXVIII. International Symposium on Molecular Beams, Edinburgh, 2019.06.24. (poszter)
12. **Tasi D. A.**, Czakó G.: *Különböző nukleofilek metil-halogenidekkel történő $\text{S}_{\text{N}}2$ reakcióinak elméleti vizsgálata.* Debrecen, I. FKF Szimpózium, 2019.04.04.
13. **Tasi D. A.**, Fábíán Z., Czakó G.: *Az $\text{X}^- + \text{CH}_3\text{Y}$ [$\text{X} = \text{OH}, \text{SH}, \text{CN}, \text{PH}_2, \text{NH}_2$; $\text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$] $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók inverziós és retenciós reakcióútjainak nagypontosságú ab initio feltérképezése.* Veszprém, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági ülés, 2018.11.08.
14. **Tasi D. A.**, Czakó G.: *A OH^- , SH^- és CN^- metil-halogenidekkel történő $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók potenciálisenergia-felületeinek nagypontosságú kvantumkémiai vizsgálata.* Szeged, XLI. Kémiai Előadói Napok, 2018.10.16.
15. **Tasi D. A.**, Csontos J., Nagy B., Kónya Z., Tasi Gy.: *Fém-oxid nanorészecskék E. coli baktériumokra vonatkozó toxicitásának elméleti vizsgálata nano-QSAR modellekkel.* Szeged, KeMoMo-QSAR Szimpózium, 2018.05.25.
16. **D. A. Tasi**, G. Czakó: *A $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{Y}$ [$\text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$] $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók inverziós és retenciós reakcióútjainak nagypontosságú ab initio feltérképezése.* Szeged, KeMoMo-QSAR Szimpózium, 2018.05.25.