

Doktori (Ph.D.) értekezés tézisei

**Az OH gyök reakcióinak elméleti vizsgálata C_2H_6 , CH_3NH_2 és
glicin molekulákkal**



Gruber Balázs

Témavezető:

Dr. Czakó Gábor

Egyetemi docens

a Magyar Tudományos Akadémia (MTA) doktora

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Kémia Doktori Iskola

MTA-SZTE Lendület Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport

Szeged, 2024

1 BEVEZETÉS ÉS CÉLKITŰZÉSEK

Az elmúlt 50 évben a kvantumkémia hatalmas fejlődésen ment keresztül, amely lehetővé tette, hogy ma már több mint 10 atomos kémiai rendszerek energetikája is megismerhető nagy pontosságú *ab initio* módszerek használatával. A reakciók dinamikájának tanulmányozásához különféle dinamikai szimulációk alkalmazhatók, beleértve a klasszikus trajektóriákat és a kvantumdinamikai számításokat. A dinamikai technikák közül a kvázi-klasszikus trajektória (*quasi-classical trajectory*, QCT) módszer kiemelkedően hasznos, mivel ötvözi a kvantummechanikai elveket, amelyek pontosan leírják a reagáló molekulák kezdeti energiaállapotait, a klasszikus fizikával, amely az atomok mozgását modellezi a reakció során. Ez a megközelítés jelentős előnyöket kínál a tisztán kvantummechanikai módszerekkel szemben, amelyek nagy rendszerek vagy komplex reakciók esetén rendkívül számításigényesek lehetnek. Analitikus potenciálisenergia-felületek használatával a QCT képes nagy számú trajektóriát kezelni, ami biztosítja a magas statisztikai megbízhatóságot és lehetővé teszi a reakcióvalószínűségek, integrális és differenciális keresztmetszetek, energiaeloszlások, valamint a termékek arányainak pontos meghatározását. Ezen fejlődésekre alapozva a kutatásom az OH gyök reakcióinak elméleti vizsgálatára összpontosított etán (C_2H_6), metil-amin (CH_3NH_2) és glicin (H_2NCH_2COOH) molekulákkal, különös figyelmet fordítva energetikájuk és dinamikájuk megismerésére.

Az etán fontos alkotóeleme a földgáznak és különböző ipari kibocsátásokban is megtalálható. Az OH gyök alapvető szerepet játszik az etán lebontásában, amely hatással van a másodlagos szennyező anyagok keletkezésére, és így a levegőminőségre. Az $OH + C_2H_6$ reakció tanulmányozása ezért segíthet jobban megérteni az etán légköri kémiai hatásait, az égési folyamatokat és ipari alkalmazásokat, ami elősegítheti a szennyezés hatékonyabb kontrollját és a folyamatok optimalizálását.

A korábbi tanulmányok az $OH + C_2H_6$ reakcióval kapcsolatban elsősorban a H-absztrakciós reakcióútra összpontosítottak, azonban a reakció során szubsztitúció is előfordulhat, amely kétféleképpen is végbemehet. Ha a szubsztitúció a Walden-inverziós mechanizmuson keresztül játszódik le, akkor a támadó molekula a távozó csoporttal ellentétes oldalról közelíti meg a másik molekulát. Abban az esetben, ha a szubsztitúciós reakció az előlről támadásos mechanizmus szerint megy végbe, akkor a támadó molekula a távozó

csoport mellől közelíti meg a másik molekulát. A kutatásom célja, hogy az eddigi irodalomhoz képest példátlan pontossággal, kvantumkémiai módszerek segítségével feltérképezsem a reakció stacionárius pontjait figyelembe véve mind a H-, mind a metil-szubsztitúciós reakciókat, megfontolva a Walden- és előlről támadásos mechanizmusok lehetőségét is. Az azonosított stacionárius pontok felhasználásával ezt követően egy teljes dimenziós, analitikus potenciálisenergia-felületet kívánok fejleszteni, amely lehetővé teszi a alapállapotú és rezgésileg gerjesztett reakciók dinamikájának tanulmányozását.

A metilamin természetes és ipari forrásokból kerül a légkörbe, ahol a OH gyökökkel reakcióba lépve bomlik le. Ez a folyamat egyszerre csökkenti a légköri koncentrációját a metilaminnak és elősegíti a másodlagos szennyező anyagok, mint például a nitraminok és szerves nitrátok képződését. A reakció vizsgálata nemcsak a légköri hatások miatt fontos, hanem biológiai szempontból is jelentős. A metilamin OH gyökökkel való oxidációja olyan reaktív termékek, mint a formaldehid és a formamid képződéséhez vezet, amelyek megzavarhatják a fehérjék működését és az enzimek aktivitását, így ez a reakció alapvető szerepet játszik az oxidatív stressz és annak sejtekre gyakorolt hatásainak megértésében.

Az OH + CH₃NH₂ reakció kapcsán, csakúgy mint a OH + C₂H₆ reakció esetében, a korábbi kutatások leginkább a hidrogénelvonási reakcióúra fókuszáltak. A H-absztrakció kétféleképpen játszódhat le, mivel az OH gyök elvonhat egy hidrogénatomot a CH₃NH₂ molekula metil- és aminocsoportjáról is. Ebben a kémiai rendszerben a szubsztitúciós reakció szintén lehetséges, amely végbemehet a Walden- vagy az előlről támadásos mechanizmus szerint, valamint mivel a metilamin mindkét vége (a CH₃ és NH₂ csoportok) kicserélhető, a H- és metil-szubsztitúció mellett a NH₂-szubsztitúciós reakció szintén egy lehetséges reakciócsatornaként jelenik meg. Kutatásom célja, hogy a korábbi tanulmányokat túlszárnyalva feltérképezsem a reakció kulcsfontosságú stacionárius pontjait minden lehetséges reakcióút figyelembe vételével. Ezen túlmenően célom, hogy becslést adjak a H-absztrakciós reakció sebességi együtthatóira az átmeneti állapot elmélet segítségével.

Az OH + glicin H-absztrakciós reakciónak a vizsgálata mind a légköri, mind a biokémiai kutatások szempontjából fontos. A glicin biológiai és ipari forrásokból egyaránt a légkörbe kerülhet, ahol az OH gyökök hatására bomlik le. Ennek a reakciónak a megértése segít meghatározni a glicin szerepét és viselkedését a légköri folyamatokban. Emellett ez a reakció

értékes információkat nyújthat a biomolekulák reakcióképességéről és átalakulásukról a biológiai rendszerekben.

A glicin molekula három funkciós csoporttal is rendelkezik, amelyek lehetővé teszik a OH gyök számára, hogy a CH₂, NH₂ és COOH csoportok bármelyikéről hidrogént vonjon el a H-absztrakció során. Kutatócsoportunk korábban már részletesen feltérképezte a reaktánsok és termékek konformációs terét e reakció kapcsán, ezzel felmutatva a legpontosabb eredményeket a szakirodalomban. A glicin molekula esetében 8 különböző konformer létezik, valamint kutatócsoportunk 4-4 eltérő szerkezetet azonosított a termékek esetén, amikor a H-absztrakció a glicin molekula CH₂ és COOH csoportjain történik, valamint 7 különböző szerkezetet, amikor a H-absztrakció az aminocsoporton megy végbe. A kutatócsoportunk korábbi eredményeire alapozva célul tűztem ki, hogy felderítem a reakció potenciálisenergia-felületének átmeneti állapotait és termékcsatornabeli minimumait. Az így meghatározott, valamint a már azonosított reaktáns- és termék szerkezeteket felhasználva további célom egy teljes dimenziós, analitikus potenciálisenergia-felület fejlesztése, amely lehetővé teszi a OH + glicin H-absztrakciós reakció dinamikájának alapos megértését.

2 MÓDSZEREK

A geometriai optimálásokat és a harmonikus frekvenciaszámításokat mindhárom kémiai rendszer esetében három lépésben végeztük el. Az OH + C₂H₆ és OH + CH₃NH₂ reakciók esetében ugyanazt a három elméleti szintet alkalmaztuk, melyek esetében a geometriai optimálásokat és a harmonikus frekvenciaszámításokat először MP2/aug-cc-pVDZ szinten hajtottuk végre, majd ezeket követték a csatolt-klaszter számítások aug-cc-pVDZ és aug-cc-pVTZ báziskészletekkel. Az OH + glicin H-absztrakciós reakció átmeneti állapotainak és minimumainak azonosítása érdekében egy szisztematikus keresést hajtottunk végre, mely során a kémiai intuíció alapján azonosított MP2/3-21G szerkezeteket négy különböző torziós mód mentén elforgattuk, melynek eredményeképpen 1296 kezdeti szerkezethez jutottunk. Ezt követően az így előállt szerkezetekből kiindulva elvégeztük először MP2/3-21G elméleti szinten a geometriai optimálásokat és harmonikus frekvenciaszámításokat, majd az így kapott szerkezeteket felhasználva újra elvégeztük MP2/aug-cc-pVDZ elméleti szinten a geometriai optimalizálásokat és harmonikus frekvenciaszámításokat. Végül ugyanazt az eljárást hajtottuk végre CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVDZ elméleti szintet alkalmazva.

A geometriai optimálások és harmonikus frekvenciaszámítások elvégzése után „*single-point*” energiaszámításokat hajtottunk végre a legpontosabb geometriákon. Először az energiákat CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVQZ elméleti szinten pontosítottuk, majd ezen felül öt különböző korrekciós számítást végeztünk el, hogy a valódi energiát a lehető legjobban közelítsük. Hogy meghatározzuk a törzselektronok korrelációjának hozzájárulását az energiához ún. „*all-electron*” számításokat végeztünk, és magát a törzskorrekciót az „*all-electron*” és „*frozen-core*” számítások különbségeként kaptuk meg. Hogy meghatározzuk a T és [(Q)] korrekciók nagyságát, ezzel megbecsülve a perturbatív közelítés, CCSD(T), pontosságát, CCSDT és CCSDT(Q) módszerekkel végeztünk számításokat. A korrekciókat úgy kaptuk meg, hogy a CCSDT energiákból kivontuk a CCSD(T) eredményeket, illetve a CCSDT(Q) adatokból a CCSDT energiaértékeket. A skaláris relativisztikus hatások figyelembe vételéhez kivontuk a nem-relativisztikus „*all-electron*” számítások eredményeit a relativisztikus hatásokat figyelembe vevő Douglas–Kroll operátorral kapott energiaértékekből. Az utolsó korrekció, melyet megfontoltam, a spin-pálya korrekció volt. A spin-pálya számításokat a Davidson-korrigált multireferencia konfigurációs kölcsönhatás (MRCI+Q) módszerrel, a Breit–

Pauli Hamilton-operátort alkalmazva, a kölcsönható-állapotok közelítés alkalmazásával végeztük.

Az $\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_6$ és $\text{OH} + \text{glicin}$ reakciók esetében a teljes dimenziós, analitikus potenciálisenergia-felületek fejlesztését a ROBOSURFER programcsomag segítségével végeztük. Mindkét esetben az energiapontokat csatolt-klaszter minőségben számítottuk. Az illesztést a monomiális szimmetrizációs közelítéssel (*monomial symmetrization approach*, MSA) hajtottuk végre, és a koefficienseket a lineáris legkisebb négyzetek módszerével határoztuk meg. A reakciódinamikát mindkét reakció esetében a QCT módszerrel vizsgáltuk. A szimulációk elemzéséhez a saját Fortran 90 programjaimat használtam.

Végül az $\text{OH} + \text{CH}_3\text{NH}_2$ reakció H-absztrakciós csatornájára vonatkozó sebességi együtthatókat a 295-3000 K hőmérséklet-tartományban az átmeneti állapot elmélet alapján határoztuk meg. A molekulák teljes állapotösszegeit a translációs, forgási, rezgési és elektronikus hozzájárulások szorzataként származtattuk, melyek számítása a standard képletek alapján történt. A forgási komponensek számításához a merev rotátor modellt, a rezgési komponensek meghatározásához pedig a harmonikus oszcillátor modellt használtuk. Az alagút-effektus figyelembe vételére az ún. Wigner-korrekciót alkalmaztuk, ezzel növelve becsléseink pontosságát.

3 EREDMÉNYEK

T1. Az OH + C₂H₆ reakció potenciálisenergia-felületét feltérképeztük minden eddiginél magasabb elméleti szintet alkalmazva, amely során a szubsztitúciós reakciókhoz tartozó stacionárius pontokat először azonosítottuk az irodalomban. A három termékcsatorna esetén az adiabatikus reakcióhőket összehasonlítottuk az Aktív Termokémiai Táblázatból vett értékekkel és megállapítottuk, hogy az egyezés kitűnő, hiszen két esetben is a reakcióhők hibahatáron belül megegyeznek, a harmadikban pedig az eltérés kevesebb, mint 0,2 kcal/mol.

Az OH + C₂H₆ reakció esetében a potenciálisenergia-felületen megjelenő átmeneti állapotokat és minimumokat CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVTZ elméleti szinten azonosítottuk a H-absztrakciós, H- és metil-szubsztitúciós reakcióutakat is megfontolva. Az így kapott geometriákat felhasználva további „*single-point*” energiaszámításokat végeztünk CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVQZ elméleti szinten. Az energia pontosítása érdekében a post-CCSD(T), törzs, skaláris relativisztikus és spin-pálya korrekciókat is figyelembe vettük. A klasszikus relatív energiákat a CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVQZ energiák és a korrekciók összegeként származtattuk. Ezen felül a CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVTZ elméleti szinten kapott harmonikus frekvenciákat felhasználva, a zérusponti energiákat hozzáadva a klasszikus energiákhoz kaptuk meg az adiabatikus energiákat. Reakcióhőinket összevetve az Aktív Termokémiai Táblázatból számolható adatokkal megállapíthatjuk, hogy a H- és metil-szubsztitúciós reakciók esetében hibahatáron belüli kiváló egyezés tapasztalható, míg a H-absztrakciós reakció esetében az elméleti és kísérleti eredmények jó egyezést mutatnak mindössze csupán 0,2 kcal/mol eltéréssel.

T2. Az OH + C₂H₆ reakció esetén a dinamikai szimulációk megmutatták, hogy a H-absztrakció jelentősen dominál a másik két (metil- és H-szubsztitúció) termékcsatornával szemben. H-absztrakció esetén alacsony ütközési energiákon a visszapattanásos mechanizmus a meghatározó, majd az ütközési energia növelésével egyre inkább a direkt lehasításos mechanizmus kerül előtérbe.

A OH + C₂H₆ reakció esetében elvégzett QCT szimulációk alapján meghatároztuk a H-absztrakciós, H-szubsztitúciós és metil-szubsztitúciós reakciócsatornák integrált hatáskeresztmetszeteit 10, 20, 30, 40 és 50 kcal/mol ütközési energiákon. Megállapítottuk, hogy a domináns reakcióút a H-absztrakció, hiszen a H- és metil-szubsztitúciós reakcióutak integrált hatáskeresztmetszet értékei még a legmagasabb ütközési energián is csak 0,02 és 0,03 bohr². Ezen kívül meghatároztuk a reakcióvalószínűségeket és a szórási szögeloszlásokat az egyes ütközési energiákon és az eredmények alapján azt a következtetést vontuk le, hogy alacsony ütközési energiáknál a visszapattanásos mechanizmus dominál, míg az ütközési energia növekedésével a direkt lehasításos mechanizmus kerül előtérbe a H-absztrakciós reakció során.

T3. Az OH + C₂H₆ reakció esetén dinamikai szimulációkat végeztünk, melyek során a reakció kezdetén a reaktánsok egy kiválasztott rezgési módusát egy kvantummal gerjesztettük és megállapítottuk, hogy a CC kötés rezgési gerjesztése csökkenti, az OH kötésé nem befolyásolja, valamint a C₂H₆ molekula CH nyújtásainak gerjesztése növeli a H-absztrakció reaktivitását.

A QCT szimulációk segítségével megvizsgáltuk, hogy milyen hatással van az OH + C₂H₆ reakció dinamikájára, ha a reaktánsok egy kiválasztott rezgési módját egy kvantumnyi energiával gerjesztjük. A trajektóriák kezdetén normálmód-mintavételezéssel öt rezgési módot gerjesztettünk az etánban és egy módot a OH gyökben. A C₂H₆ esetén a CC nyújtási, a CH₃ deformációs, valamint háromféle CH nyújtási (szimmetrikus, aszimmetrikus és degenerált) módot gerjesztettünk. A OH gyök esetében a molekulában lévő egyetlen rezgési módot gerjesztettük. A trajektóriák elemzése és az integrált hatáskeresztmetszetek meghatározása révén kiderült, hogy a CC kötés rezgési gerjesztése kissé csökkenti a reaktivitást, az OH nyújtásnak nem volt jelentős hatása, míg a CH nyújtás gerjesztése növelte a reaktivitást.

T4. Meghatároztuk az OH + CH₃NH₂ multicSATornás reakció stacionárius pontjait, és megállapítottuk, hogy a szubsztitúciós reakciók esetén a Walden-inverzió lejátszódásához magasabb energiagát tartozik, mint az előlről-támadásos mechanizmushoz.

Nagy pontosságú *ab initio* módszerek segítségével feltérképeztük az átmeneti állapotokat és minimumokat az OH + CH₃NH₂ reakció potenciálisenergia-felületén. A geometriai optimálásokat és harmonikus frekvenciaszámításokat MP2/aug-cc-pVDZ, CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVDZ és CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVTZ elméleti szinteken végeztük el. Ezt követően az energiákat pontosítottuk CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVQZ elméleti szinten és további korrekciós számításokat hajtottunk végre, hogy figyelembe vegyünk a post-(T) korreláció hatását, a törzselektronok korrelációjának hatását, valamint a skaláris relativisztikus és spin-pálya kölcsönhatásokból eredő effektusokat. A klasszikus benchmark energiák a „*single-point*” energiák összegeként jöttek létre. Az adiabatikus energiák számolása során a klasszikus energiákhoz hozzáadtuk a zérus ponti energiákat. A reakció energiaprofilja alapján megállapítható, hogy a CH₃ csoporton lejátszódó H-szubsztitúciós és amino-szubsztitúciós reakciók esetén az előlről-támadás a kinetikailag preferáltabb mechanizmus a Walden inverzióval szemben.

T5. Az OH + glicin H-absztrakciós reakció átmeneti állapotait és termékcsatornabeli minimumait három különböző kvantumkémiai szinten feltérképeztük egy szisztematikus keresést végrehajtva, mely során három reakcióutat vettünk figyelembe: a CH₂, NH₂ és COOH csoportokon végbemenő H-absztrakciós reakciókat. A legmagasabb elméleti szinten (CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVDZ) átmeneti állapotok esetén 5-5-5 szerkezetet azonosítottunk, illetve termékcsatornabeli minimumok esetén 2 (CH₂) és 19 (NH₂) konformert sikerült meghatározni.

Egy szisztematikus keresést hajtottunk végre annak érdekében, hogy azonosítsuk az OH + glicin H-absztrakciós reakció során előforduló átmeneti állapotokat és termékcsatornabeli minimumokat, valamint ezek lehetséges konformereit. Mivel a H-absztrakció a glicin molekula három különböző részén is megtörténhet, ezért megkülönböztethetünk CH₂-, NH₂- és COOH-H-absztrakciós reakciókat. A szisztematikus keresés során egy korábban meghatározott szerkezetet négy különböző torziós mód mentén 60 fokként elforgatva 1296 kezdeti

szerkezetet generáltunk. Első lépésben a geometriai optimálásokat és harmonikus frekvenciaszámításokat MP2 módszerrel 3-21G báziskészletet használva végeztük el. Ezt követően az így kapott szerkezetekből kiindulva további geometriai optimálásokat és harmonikus frekvenciaszámításokat hajtottunk végre MP2/aug-cc-pVDZ elméleti szinten. Végül felhasználva az MP2/aug-cc-pVDZ szerkezeteket a geometriai optimálásokat és harmonikus frekvenciaszámításokat a CCSD(T)-F12b módszert aug-cc-pVDZ báziskészlettel kombinálva is elvégeztük. Ennek a folyamatnak az eredményeképpen mindháromféle H-absztrakciós reakció esetén öt különböző átmeneti állapot szerkezetet azonosítottunk, valamint 19 $\text{H}_2\text{O}\cdots\text{HNCH}_2\text{COOH}$ és 2 $\text{NH}_2\text{CHCOOH}\cdots\text{H}_2\text{O}$ termékcsatornabeli komplexet határoztunk meg.

T6. Az OH + glicin reakció esetén a dinamikai szimulációk megmutatták, hogy a karboxil csoporton végbemenő H-absztrakciót követően a reakció tovább folytatódhat, így végül H_2O , CH_2NH_2 és CO_2 molekulákat kapunk termékeként.

Egy teljes-dimenziós, analitikus potenciálisenergia-felület kifejlesztését követően a OH + glicin reakció dinamikáját a QCT módszer segítségével tanulmányoztuk. A szimulációkat 1, 5, 10, 15 és 20 kcal/mol-os ütközési energiák esetén hajtottuk végre. Mind a 8 reaktánskonformer esetén 1000 trajektóriát futtattunk minden egyes ütközési energia és ütközési paraméter kombinációnál, így összesen 504 000 szimulációt végrehajtva vizsgáltuk a reakciót. A trajektóriákat elemezve megállapítottuk, hogy karboxil csoporton végbemenő H-absztrakció esetén a keletkező dehidrogénezett glicin molekula széteshet CO_2 és CH_2NH_2 molekulákra. Továbbá a számolt integrális hatáskeresztmetszetek alapján elmondható, hogy az esetek túlnyomó többségében a reakció nem áll meg a karboxil csoporton dehidrogénezett glicin molekulánál, hanem tovább folytatódik, így CO_2 , H_2O és CH_2NH_2 termékeket eredményezve. Végül, a QCT szimulációk arra is rávilágítottak, hogy a II_n és VII_p glicin konformerek esetén lehetséges olyan mechanizmus is e 3 fragmenses COOH-H-absztrakció esetén, amikor első lépésben a karboxilcsoporton lévő H átkerül az aminos csoportra, kialakítva ezzel egy ún. „biradikális” szerkezetet, majd ezt követően maga az absztrakció az N atomon megy végbe.

4 A DOLGOZAT ALAPJÁT KÉPZŐ KÖZLEMÉNYEK

[¹] **Gruber B.** és Czakó G.: *Benchmark ab initio characterization of the abstraction and substitution pathways of the OH + CH₄/C₂H₆ reactions*, Phys. Chem. Chem. Phys., 22, 14560 (2020) IF: 3,676

[²] **Gruber B.**, Tajti V. és Czakó G.: *Full-dimensional automated potential energy surface development and dynamics for the OH + C₂H₆ reaction*, J. Chem. Phys., 157, 074307 (2022) IF: 3,945

[³] **Gruber B.** és Czakó G.: *High-level ab initio mapping of the multiple H-abstraction pathways of the OH + glycine reaction*, Phys. Chem. Chem. Phys., 25, 5271 (2023) IF: 3,3

[⁴] **Gruber B.**, Tajti V. és Czakó G.: *Vibrational mode-specific dynamics of the OH + C₂H₆ reaction*, J. Phys. Chem. A, 127, 7364 (2023) IF: 2,9

[⁵] Czakó G., **Gruber B.**, Papp D., Tajti V., Tasi A. D. és Yin C.: *First-principles mode-specific reaction dynamics*, Phys. Chem. Chem. Phys., 26, 15818 (2024) IF: 3,3

[⁶] **B. Gruber** és G. Czakó: *High-level ab initio characterization of the OH + CH₃NH₂ reaction*, Phys. Chem. Chem. Phys., 26, 28543 (2024) IF: 2,9

ΣIF = 20,021

5 TOVÁBBI KÖZLEMÉNYEK

[⁷] Papp D., **Gruber B.** és Czakó G.: *Detailed benchmark ab initio mapping of the potential energy surfaces of the X + C₂H₆ [X = F, Cl, Br, I] reactions*, Phys. Chem. Chem. Phys., 21, 396 (2019) IF: 3,430

ΣIF = 3,430

ΣΣIF = 23,451

6 KONFERENCIA-ELŐADÁSOK

- [¹] **Gruber B.** és Czakó G.: *A OH + CH₄ és C₂H₆ reakciók tanulmányozása a standard kvantumkémián túl*, Online, Országos Tudományos Diákköri Konferencia (2021)
- [²] **Gruber B.** és Czakó G.: *Az OH gyök reakciója metán, etán és glicin molekulákkal*, Mátrafüred, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági ülés (2021)
- [³] **Gruber B.**, Tajti V. és Czakó G.: *Az OH + C₂H₆ reakció dinamikája egy automatikusan fejlesztett potenciálisenergia-felületen*, Mátrafüred, MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottsági ülés (2022)
- [⁴] **Gruber B.** és Czakó G.: *Csatolt-klaszter minőségű potenciálisenergia-felület fejlesztése és a dinamika tanulmányozása teljes (30) dimenzióban: a glicin + OH reakció*, Mátrafüred, MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottsági ülés (2023)
- [⁵] **Gruber B.** és Czakó G.: *Az OH gyök reakcióinak elméleti vizsgálata C₂H₆, CH₃NH₂ és glicin molekulákkal: a glicin + OH reakció*, Szeged, KeMoMo-QSAR Szimpózium (2024)

7 POSZTEREK

- [¹] **Gruber B.**, Tajti V. és Czakó G.: *Theoretical investigation of the reactions of OH with ethane and glycine*, Snowbird, Utah, USA, Dynamics of Molecular Collisions (2023)
- [²] **Gruber B.** és Czakó G.: *Exploring the dynamics of the OH + glycine H-abstraction reaction using an in-house-developed analytical potential energy surface*, Edinburgh, UK, New directions in molecular scattering Faraday Discussion (2024)