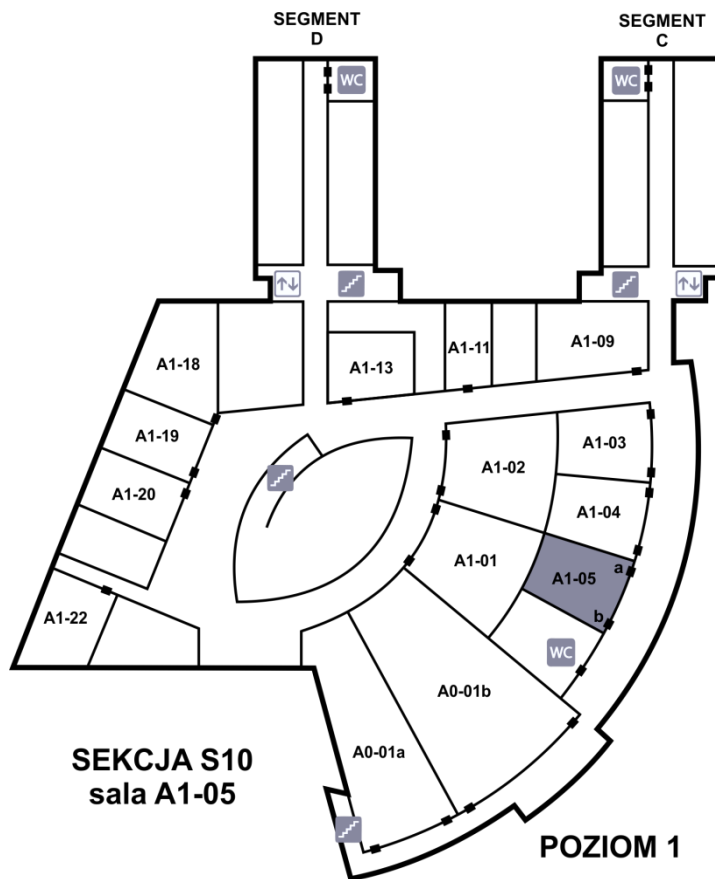


**program obrad sekcji S10:
CHEMIA TEORETYCZNA I OBLICZENIOWA**



**PRZEWODNICZĄCY SEKCJI:
Tomasz Borowski (IKiFP PAN)
Andrzej Koleżyński (AGH)**

WTOREK 18 września 2018

S10

SESJA POPOŁUDNIOWA 15:00-17:45

PRZEWODNICZĄCY SESJI: Mariusz Puchalski

| | | |
|-------------|----------------|---|
| 15:00-15:30 | S10WS01 | Zastosowanie topologicznej analizy funkcji lokalizacji elektronów, ELF, do badania natury wiązań chemicznych i mechanizmów reakcji chemicznych Sławomir Berski |
| 15:30-16:00 | S10WS02 | Superkwasy Lewisa-Brønsteda – struktura, kwasowość i właściwości katalityczne <u>Piotr Skurski</u> , Marcin Czapla, Olimpia Rybacka, Jakub Brzeski, Iwona Anusiewicz, Sylwia Freza |
| 16:00-16:15 | S10KS01 | ETS-NOCV decomposition of the reaction force <u>Artur Michalak</u> , Silvia Diaz, Mateusz Brela, Piotr Talaga |
| 16:15-16:30 | S10KS02 | Nowe właściwości silnych centrów kwasowych w dealuminowanym mazzyście: badania IR za pomocą sorpcji CO oraz modelowanie periodycznymi metodami DFT <u>Ewa Brocławik</u> , Jerzy Datka, Paweł Rejmak |
| 16:30-16:45 | S10KS03 | Anionowe klastery superhalogenowe (AsF₆(HF)_n)⁻ i (SbF₆(HF)_n)⁻ (n=1-6,12) <u>Marcin Czapla</u> , Olimpia Rybacka, Jakub Brzeski, Piotr Skurski |
| 16:45-17:00 | S10KS04 | Wpływ defektów V_{Ag} i Sb_{Ag} na strukturę i właściwości AgSbTe₂ – obliczenia DFT <u>Wojciech Szczypka</u> , Andrzej Koleżyński |
| 17:00-17:15 | S10KS05 | Understanding spectral features and optical activity in helicene derivatives <u>Monika Srebro-Hooper</u> , Jeanne Crassous |
| 17:15-17:30 | S10KS06 | Symulacja jedno- i dwufotonowych widm absorpcyjnych wybranych modeli zielonego białka fluorescencyjnego (GFP) metodami chemii kwantowej <u>Dawid Grabarek</u> , Tadeusz Andruniów |
| 17:30-17:45 | S10KS07 | Wydajność liganda – paradoks interakcji między deskryptorem a właściwością <u>Anna Pedrys</u> , Jarosław Polański, Roksana Duszakiewicz, Johann Gasteiger |

ŚRODA 19 września 2018

SESJA PRZEDPOŁUDNIOWA 11:00-13:00

PRZEWODNICZĄCY SESJI: Sławomir Berski

| | | |
|-------------|----------------|--|
| 11:00-11:30 | S10WS03 | Modeling electronic structures with electron pair states Katharina Boguslawski |
| 11:30-12:00 | S10WS04 | Energetyka stanów spinowych: dokładne obliczenia metodami chemii kwantowej oraz uwzględnienie wpływu środowiska <u>Mariusz Radoń</u> , Gabriela Drabik, Janusz Szklarzewicz, Ewa Brocławik |

| | | |
|-------------|----------------|--|
| 12:00-12:15 | S10KS08 | Metateza olefin z punktu widzenia chemii teoretycznej i obliczeniowej Bartosz Trzaskowski |
| 12:15-12:30 | S10KS09 | Reakcja $SN_2@Si$ - rola jonu fluorkowego w hydrolizie podstawionych silanów <u>Bartłomiej Gostyński</u> , Marek Cypryk |
| 12:30-12:45 | S10KS10 | Eksperymentalny i teoretyczny opis heterozwiązków, modyfikowanych w pozycji jonu centralnego i kationu kompensującego <u>Renata Tokarz-Sobieraj</u> , Anna Micek-Ilnicka, Urszula Filek, Robert Gryboś, Małgorzata Witko |
| 12:45-13:00 | S10KS11 | Hydratacja związków tetrafenylowych na podstawie symulacji komputerowych <u>Maciej Śmiechowski</u> , Mateusz Leśniewski |

SESJA POPOŁUDNIOWA 15:00-17:45

PRZEWODNICZĄCY SESJI: Mariusz Radoń

| | | |
|-------------|----------------|--|
| 15:00-15:30 | S10WS05 | Obliczenia wysokiej precyzji z funkcjami jawnie skorelowanymi dla cząsteczki wodoru Mariusz Puchalski |
| 15:30-16:00 | S10WS06 | Coarse-grained multiscale modeling of proteins Dominik Gront |
| 16:00-16:15 | S10KS12 | Two interacting ultracold molecules in a one-dimensional harmonic trap <u>Anna Dawid</u> , Maciej Lewenstein, Michał Tomza |
| 16:15-16:30 | S10KS13 | Czynniki regulujące biodegradację izomerów HCH przez enzymy LinA <u>Agnieszka Dybała-Defratyka</u> , Kirill Zinovjev, Iñaki Tuñón |
| 16:30-16:45 | S10KS14 | Biooligosacharydy pod wpływem sił rozciągających - symulacja eksperymentu AFM Agnieszka Brzyska |
| 16:45-17:00 | S10KS15 | Modeling Lung Surfactant Interactions with Benzo[a]pyrene <u>Janek Korchowicz</u> , Anna Stachowicz-Kuśnierz, Beata Korchowicz |
| 17:00-17:15 | S10KS16 | Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych (ARUZ) i wielkoskalowa symulacja złożonych układów molekularnych <u>Andrzej Sikorski</u> , Piotr Polanowski |
| 17:15-17:45 | S10WS07 | ACK Cyfronet AGH oraz Infrastruktura PLGrid - usługi dla chemii obliczeniowej <u>Klemens Noga</u> , Mariusz Sterzel |

SESJA PLAKATOWA I
WTOREK 18 września 2018
18:00-19:00, hol A1

| | |
|---------------|--|
| S10P01 | Theoretical Analysis of Vibrational Spectra and bonding properties of Sodalite Structure <u>Andrzej Mikuła</u> , <u>Wojciech Szczypka</u> , Magdalena Król, Andrzej Koleżyński |
|---------------|--|

| | |
|---------------|---|
| S10P02 | Theoretical studies on the cobalt(III)-based catalysts for CO₂/epoxide copolymerization <u>Artur Michalak</u> , Karol Dyduch, Monika Srebro-Hooper |
| S10P03 | Refinement of the OPLS-AA force field parameters for phospholipids. Theoretical studies on triacetin molecule <u>Anna Wójcik-Augustyn</u> , Maciej Bratek, Krzysztof Murzyn |
| S10P04 | Modelowanie mechanizmów reakcji Δ^1-dehydrogenaz-3-ketosteroidowych <u>M. Głanowski</u> , A. Wojtkiewicz, S. Mordalski, M. Szaleniec, A. Bojarski |
| S10P05 | Kationowe kompleksy rutenu w katalizie homogenicznej – metody obliczeniowe <u>Magdalena Jawiczuk</u> , Bartosz Trzaskowski |
| S10P06 | Theoretical studies on a Schiff-based turn-on fluorescent chemosensors for metal ions <u>Mercedes Kukułka</u> , Mariusz P. Mitoraj, Monika Srebro-Hooper |
| S10P07 | Analiza obliczeniowa boranowych analogów N-heterocyklicznych karbenów wykorzystywanych w reakcji metatezy olefin <u>Katarzyna Młodzikowska</u> , Bartosz Trzaskowski |
| S10P08 | Electronic band structures of h-CBN on substrates James Hooper |
| S10P09 | Metoda sprzężonych klasterów w ujęciu przestrzeni Focka w zastosowaniu do wyznaczania krzywych energii potencjalnej dla cząsteczek LiH i NaH <u>Artur Lisoń</u> , Monika Musiał |
| S10P10 | Modelowanie układu cytochrom-grafen <u>Alicja Kowalska</u> , Bartosz Trzaskowski, Silvio Osella |
| S10P11 | Kwasowość związków kompleksowych z układem AlF₃ w roli akceptora wolnej pary elektronowej <u>Olimpia Rybacka</u> , Jakub Brzeski, Iwona Anusiewicz, Piotr Skurski |
| S10P12 | Molecular modelling of fluorinated chiral liquid crystalline esters <u>Magdalena Dziurka</u> , Aleksandra Deptuch, Teresa Jaworska-Gołąb, Monika Marzec, James Hooper, Monika Srebro-Hooper |
| S10P13 | The role of the binding pocket of dioxygenase AsqJ in reaction selectivity - a QM/MM study <u>Zuzanna Wojdyła</u> , Tomasz Borowski |
| S10P14 | Modelowanie struktur kompleksów rutenowych z cyklicznymi allenowymi ligandami jako katalizatory metatezy olefin <u>Angelika Janaszkiwicz</u> , Bartosz Trzaskowski |
| S10P15 | An Extension of the Charge and Energy Decomposition Scheme (ETS-NOCV) – On the Importance of Kinetic and Potential Energy Contributions in Chemical Bonding <u>Filip Sagan</u> , Mariusz P. Mitoraj |
| S10P16 | Guiding Rosetta abinitio protocol with backbone NOE data <u>Justyna Kryś</u> , Daria Wultańska, Dominik Gront |
| S10P17 | Kinetyka reakcji rodnika hydroksylowego z wielopierścieniowymi węglowodorami aromatycznymi <u>Maciej Baradyn</u> , Artur Ratkiewicz |
| S10P18 | Teoretyczne badania natury wiązania halogenowego w układach typu OC...XY <u>Łukasz Fojcik</u> , Zdzisław Latajka |
| S10P19 | Modelowanie wpływu obecności rozpuszczalnika na widma N NMR heterocyklicznych związków azotu Agnieszka Brzyska |
| S10P20 | On the multiple B–O bonding using the topological analysis of Electron Localisation Function (ELF) <u>Grzegorz Mierzwa</u> , Agnieszka J. Gordon, Zdzisław Latajka, Sławomir Berski |

