

Sekcja S07

Chemia teoretyczna i obliczeniowa

sala: 0.31, budynek C-13, Politechnika Wrocławska

wtorek, 23 września 2025 r.

Przewodniczący: **Marcin Hoffmann**

S07 W01 13.45-14.30	<u>Dominika Zgid</u> , Vibin Abraham, Jacob Adamski, Selina Dirnboeck, Gaurav Harsha, Pavel Pokhilko, Munkhorgil Wang, Ming Wen <i>Fully self-consistent finite temperature GW for correlated systems</i>
S07 W02 14.30-15.00	<u>Michał Tomza</u> <i>Kwantowa kontrola ultrazimnych zderzeń i reakcji chemicznych</i>
S07 W03 15.00-15.30	<u>Piotr Żuchowski</u> , Bartosz Tyrcha, Konrad Patkowski <i>propSAPT</i>
S07 K01 15.30-15.45	<u>Marta Gałyńska</u> , Ram Dhari Pandey, Lena Szczuczko, Paweł Tecmer, Katharina Boguslawski <i>A domain-based charge-transfer analysis of the first excited state calculated with EOM-PCCD+S</i>

Przewodniczący: **Wojciech Bartkowiak**

S07 W04 16.00-16.30	<u>Monika Musiał</u> <i>Wieloreferencyjna metoda sprzężonych klasterów do opisu dysocjacji wiązania pojedynczego: łatwy sposób</i>
S07 W05 16.30-17.00	<u>Michał Lesiuk</u> <i>Rank-reduced coupled cluster theory for ground and excited states</i>
S07 W06 17.00-17.30	<u>Michał Hapka</u> , Aleksandra Tucholska, Marcin Modrzejewski, Katarzyna Pernal <i>Redukcja błędu niezupełności bazy w obliczeniach energii korelacji elektronowej przez zastosowanie efektywnego oddziaływania krótkozasięgowego w hamiltonianie elektronowym</i>
S07 K02 17.30-17.45	<u>Szczepan Roszak</u> , Zygmunt Stoczewski <i>Prosta reakcja $H_2O + OH$ - która nie jest prosta</i>
S07 K03 17.45-18.00	<u>Dorota Rutkowska-Żbik</u> , Renata Tokarz-Sobieraj, Agnieszka Drzewiecka-Matuszek, Vidya Kaipanchery, Priti Sharma <i>Układy zawierające pojedyncze atomy lub małe klastry miedzi jako katalizatory do generowania wodoru: Obliczenia DFT</i>

środa, 24 września 2025 r.

Przewodniczący: **Wiktor Zierkiewicz**

S07 W07 13.45-14.15	<u>Rafał Szabla</u> <i>A Computational Perspective on the Origins of Biomolecules on Earth</i>
S07 W08 14.15-14.45	<u>Joanna Jankowska</u> , <u>Mikołaj Martyka</u> <i>Gdy nowe materiały wymagają nowych metod symulacji: dynamika separacji ładunku w wewnętrznie spolaryzowanych kowalencyjnych sieciach organicznych</i>
S07 W09 14.45-15.15	<u>Cina Foroutan-Nejad</u> <i>Collective Bonding</i>
S07 K04 15.15-15.30	<u>Jarosław Panek</u> , <u>Chaitali Barman</u> <i>Extremophilic proteins investigated via molecular dynamics methods</i>
S07 K05 15.30-15.45	<u>Kasper Witruk</u> , <u>Róża Szweda</u> , <u>Tadeusz Andruniów</u> <i>Investigating Folding Pathways in Oligourethanes: The Role of Stereochemistry in Structural Evolution</i>

Przewodniczący: **Andrzej Bil**

S07 W10 16.00-16.30	<u>Róża Szweda</u> <i>Unveiling secondary structure in non-biological polymers: a synergy of simulation and experiment</i>
S07 W11 16.30-17.00	<u>Mateusz Brela</u> , <u>Yuliia Didovets</u> , <u>Alicja Mikłas</u> , <u>Nazar Oleksiuk</u> <i>Magia oddziaływań międzycząsteczkowych: wpływ wiązań wodorowych na właściwości fizykochemiczne wybranych polimerów</i>
S07 W12 17.00-17.30	<u>Sylvio Osella</u> <i>Photo and electro catalysis from computation: novel perspectives</i>
S07 K06 17.30-17.45	<u>Anna Hoser</u> , <u>Maurycy E. Nowak</u> , <u>Helena Butkiewicz</u> <i>Czy jesteśmy w stanie przewidzieć wzajemną stabilność odmian polimorficznych?</i>
S07 K07 17.45-18.00	<u>Maksymilian Szatko</u> , <u>Tadeusz Andruniów</u> , <u>Róża Szweda</u> <i>Zwijanie sekwencyjnie zdefiniowanych oligourethanów w helisę sterowane rozpuszczalnikiem: badania metodą 2D ROESY NMR i dynamiki molekularnej</i>

czwartek, 25 września 2025 r.

Przewodniczący: **Robert Wieczorek**

S07 W13 13.45-14.15	<u>Artur Michalak</u> , Olga Żurowska, Mercedes Kukułka, Maria Różga, Franka Ninov <i>Theoretical study on mechanisms of degradation of polymeric materials for fuel-cell applications</i>
S07 W14 14.15-14.45	<u>Mariusz Michalczyk</u> , Wiktor Zierkiewicz <i>Oddziaływania niekowalencyjne kationu haloniowego</i>
S07 K08 14.45-15.00	<u>Sylwia Freza</u> <i>Aniony $Sb_n F_{5n+1}^-$ jako najsilniej związane aniony molekularne</i>
S07 K09 15.00-15.15	<u>Przemysław Dopieralski</u> , Martin Zoloff Michoff, Domink Marx <i>Wpływ Wody na Nanomechaniczny Rozpad Interfejsu Siarka-Złoto</i>
S07 K10 15.15-15.30	<u>Maria Różga</u> , Artur Michalak <i>Teoretyczne badania degradacji kationów izoindoliniowych w warunkach alkalicznych</i>

Przewodniczący: **Robert Góra**

S07 W15 16.00-16.30	<u>Andrzej Sikorski</u> , Piotr Polanowski <i>Makrocząsteczki w roztworze o różnej jakości. Symulacja komputerowa Monte Carlo</i>
S07 K11 16.30-16.45	<u>Paweł Rodziewicz</u> <i>Analiza oddziaływań międzycząsteczkowych w ciekłej hydrazynie na podstawie obliczeń DFT oraz symulacji metodą dynamiki molekularnej według Cara i Parrinello</i>
S07 K12 16.45-17.00	<u>Mikołaj Marciów</u> , Krzysztof Strasburger, Wojciech Bartkowiak <i>Cząsteczka H_2 w ograniczeniu harmonicznym: Opis procesu dysocjacji</i>
S07 K13 17.00-17.15	<u>Małgorzata Biczysko</u> <i>On the importance of property derivatives for reliable modeling of anharmonic spectra from VPT2 and hybrid QM models</i>

Sesja Posterowa S07: Chemia teoretyczna i obliczeniowa

piątek 26 września 2025 r., 8:30-9:30

budynek C-13, hol, 1. piętro

S07 P01	<u>Andrzej Bil</u> , Przemysław Dopieralski <i>Ewolucja wiązań w trakcie dysocjacji wybranych disiarczków organicznych – badania topologiczne</i>
S07 P02	<u>Łukasz Fojcik</u> , Grzegorz Mierzwa, Dariusz Sarzyński, Zdzisław Latajka <i>Theoretical Studies on the Mechanism and Kinetics of Hydrogen Atom Abstraction from Selected Chloroalkanes and Alkanes by Atomic Chlorine</i>
S07 P03	Daniel Kapuściński, Adrianna Fałowska, Karol Sambora, Stanisław Grzybowski, <u>Agnieszka Łapczuk</u> <i>Ogólne trendy reaktywności i regioselektywności w reakcjach cyklopentadienu–nitroalkenu–Dielsa–Aldera</i>
S07 P04	<u>Mikołaj Marciów</u> , Paweł Gusin <i>Hipotetyczny pierwiastek "Riemannium"</i>
S07 P05	<u>Grzegorz Mierzwa</u> , Łukasz Fojcik, Zdzisław Latajka <i>On the nature of the boron-sulfur multiple bonds from the quantum chemical topology perspective – the theoretical investigation using electron localisation function (ELF)</i>
S07 P06	<u>Roma Musik</u> , Szczepan Roszak <i>Properties of dyes used in dye sensitized solar cells- quantum chemical calculations</i>
S07 P07	<u>Kasper Witruk</u> , Eduardo Castellanos, Róża Szweda, Tadeusz Andruniów <i>Linking Molecular Conformation to ECD Signatures in Oligourethanes: Insights from Simulations and Experiments</i>