

## SEKCJA 09

### CHEMIA TEORETYCZNA I OBLICZENIOWA

Miejsce obrad: Wydział Nauk Ekonomicznych i Zarządzania, Sala VI

Przewodniczący Sekcji:

Prof. dr hab. Bogumił Jeziorski (UW, Warszawa) - Honorowy Przewodniczący

Prof. dr hab. Marcin Hoffman (UAM, Poznań)

Prof. dr hab. Maria Barysz (UMK, Toruń)

Wtorek, 19 września 2023 r.

Godzina: 11:30-13:30

Przewodniczący: prof. dr hab. Maria Barysz i prof. dr hab. Marcin Hoffmann

<b>S09 WS01</b> 11:30-12:00	<b><u>Monika Musiał</u></b> <i>Wieloreferencyjna metoda sprzężonych klasterów w zastosowaniu do opisu stanów wzbudzonych z wykorzystaniem wyższych sektorów przestrzeni Focka</i>
<b>S09 WS02</b> 12:00-12:30	<b><u>Michał Lesiuk</u></b> <i>Approximate coupled cluster models based on tensor decomposition techniques</i>
<b>S09 WS03</b> 12:30-13:00	<b><u>Mariusz Pawlak</u></b> <i>Efekty niesztymności cząsteczek w niskoenergetycznych zderzeniach reaktywnych</i>
<b>S09 KS01</b> 13:00-13:15	<b><u>Karolina Kula</u></b> , Radomir Jasiński <i>Reakcja cykloaddycji (2E,4E)-2,5-dinitro-2,4-heksadienu z diazometanem w świetle Teorii Molekularnej Gęstości Elektronowej</i>
<b>S09 KS02</b> 13:15-13:30 <b>FM</b>	<b><u>Grzegorz Niedzielski</u></b> , James Hooper <i>Badanie emisji w kryształach molekularnych za pomocą periodycznych obliczeń GGA+U</i>

Wtorek, 19 września 2023 r.

Godzina: 14:30-16:30

Przewodniczący: prof. dr hab. Maria Barysz i prof. dr hab. Grzegorz Chałasiński

<b>S09 WS04</b> 14:30-15:00	<b><u>Monika Srebro-Hooper</u></b> <i>Understanding photophysical properties of organic and organometallic systems via TD-DFT studies</i>
<b>S09 WS05</b> 15:00-15:30	<b><u>Rafał A. Bachorz</u></b> <i>The application of AI-driven Drug Discovery technology for molecular optimization of nuclear receptor ligands</i>
<b>S09 WS06</b> 15:30-16:00	<b><u>Maciej Szaleniec</u></b> , Michał Glanowski, Agnieszka Wojtkiewicz, Agnieszka Winiarska <i>Eksperyment bez teorii jest ślepy, teoria bez eksperymentu jest jedynie intelektualną zabawą</i>
<b>S09 KS03</b> 16:00-16:15	<b><u>Anna Kaczmarek-Kędziera</u></b> , Dariusz Kędziera, Patryk Rybczyński, Borys Ośmiałowski, Piotr S. Żuchowski

	<i>Challenges for rational fluorophore design in condensed phase with quantum chemistry tools</i>
<b>S09 KS04</b> 16:15-16:30	<b><u>Łukasz Wolański</u></b> , Wojciech Grochala <i>Chemiczny kondensator – badania podstawowe i przesiewowe</i>

Środa, 20 września 2023 r.

Godziny: 11:30-13:30

**Przewodniczący:** prof. dr hab. Monika Musiał i prof. dr hab. Marcin Hoffmann

<b>S09 WS07</b> 11:30-12:00	<b><u>Adam Kubas</u></b> <i>Beyond DFT: selected applications and developments of wavefunction-based methods for open-shell systems</i>
<b>S09 WS08</b> 12:00-12:30	Karina Kowalska, Mariusz Barczak, Dimitrios A. Giannakoudakis, Teresa J. Bandosz, <b><u>Piotr Borowski</u></b> <i>Chemisorpcja formaldehydu na funkcjonalizowanych powierzchniach grafenowych - badania teoretyczne</i>
<b>S09 WS09</b> 12:30-13:00	<b><u>Tatiana Korona</u></b> <i>Modelling of point defects of hexagonal boron nitride</i>
<b>S09 KS05</b> 13:00-13:15	<b><u>Marcin Czapla</u></b> , Piotr Skurski <i>Fragmentacja substancji perfluoroalkilowych (PFAS) wywołana przez <math>AlF_3</math> w środowisku wodnym</i>
<b>S09 KS06</b> 13:15-13:30 <b>FM</b>	<b><u>Karina Kowalska</u></b> , Piotr Borowski, Mariusz Barczak, Dimitrios A. Giannakoudakis, Eleni Salonikidou <i>Adsorpcja pochodnych tiofenu na funkcjonalizowanych powierzchniach grafenowych – badania teoretyczne</i>

Środa, 20 września 2023 r.

Godziny: 14:30-16:30

**Przewodniczący:** prof. dr hab. Maria Barysz i prof. dr hab. Małgorzata Witko

<b>S09 WS10</b> 14:30-15:00	<b><u>Andrzej Eilmes</u></b> , Piotr Wróbel, Piotr Kubisiak <i>Badania oddziaływań w roztworach przy pomocy widm oscylacyjnych z symulacji dynamiki molekularnej</i>
<b>S09 WS11</b> 15:00-15:30	<b><u>Aneta Jezierska</u></b> , Kamil Wojtkowiak, Kacper Błaziak, Aleksander Koll, Jarosław J. Panek <i>Opis właściwości wiązań wodorowych w wybranych związkach aromatycznych metodami dynamiki ab initio</i>
<b>S09 WS12</b> 15:30-16:00	<b><u>Lidia Chomicz-Mańka</u></b> <i>Wewnątrzcząsteczkowe przeniesienie protonu kluczem do zagadki odporności DNA na solwatowane elektrony</i>
<b>S09 KS07</b> 16:00-16:15	<b><u>Mikołaj J. Janicki</u></b> , Rafał Szabla <i>Celowana fotoredukcja tioanhydronukleozydów z udziałem kompleksów chalkogenowych</i>
<b>S09 KS08</b>	<b><u>Dominika Kaczmarczyk</u></b> , Monika Srebro-Hooper

16:15-16:30 FM	<i>Theoretical studies on photophysical properties of 7-diethylamino-4-hydroxycoumarin</i>
-------------------	--

Czwartek, 21 września 2023 r.

Godzina: 11:30-13:30

Przewodniczący: prof. dr hab. Marcin Hoffmann i prof. dr hab. Artur Michalak

<b>S09 WS13</b> 11:30-12:00	<b><u>Bartłomiej M. Szyja</u></b> <i>Charge transfers in organic complexes from CDFT simulations</i>
<b>S09 WS14</b> 12:00-12:30	<b><u>Andrzej Sikorski</u></b> <i>Szczotki polimerowe: symulacje nowych materiałów polimerowych</i>
<b>S09 WS15</b> 12:30-13:00	Vidya Kaipanchery, Agnieszka Drzewiecka-Matuszek, Renata Tokarz-Sobieraj, Małgorzata Witko, <b><u>Dorota Rutkowska-Żbik</u></b> <i>Badania aktywacji wiązań C-H w alkanach metodą DFT</i>
<b>S09 KS09</b> 13:00-13:15	<b><u>Renata Tokarz-Sobieraj</u></b> , Dorota Rutkowska-Żbik <i>Właściwości Pt/Pd wbudowanych w strukturę heteropolikwasów o strukturze Keggina - obliczenia DFT</i>
<b>S09 KS10</b> 13:15-13:30 FM	Joanna Jankowska, <b><u>Tomasz Gryber</u></b> <i>Mechanizm zużycia diaryletenów jako odwracalnych fotoprzełączników</i>

Czwartek, 21 września 2023 r.

Godzina: 14:30-16:30

Przewodniczący: prof. dr hab. Maria Barysz i prof. dr hab. Marcin Hoffmann

<b>S09 WS16</b> 14:30-15:00	Olga Żurowska, Jakub Pawełko, Rafał Wójcik, Aleksandra Roznowska, Karol Dyduch, Monika Srebro-Hooper, <b><u>Artur Michalak</u></b> <i>Theoretical modeling of catalytic activity in complex processes involving multiple reaction pathways: an example of CO<sub>2</sub>-epoxide copolymerization</i>
<b>S09 WS17</b> 15:00-15:30	Tobias Klöffel, Stanisław Popiel, Bernd Meyer, <b><u>Paweł Rodziewicz</u></b> <i>Analiza wpływu rozpuszczalnika na konformację iperytu siarkowego oraz jego rola w procesie tworzenia kationu sulfoniowego na podstawie obliczeń DFT oraz symulacji metodą dynamiki molekularnej według Cara i Parrinello</i>
<b>S09 WS18</b> 15:30-16:00	<b><u>Katharina Bogusławski</u></b> <i>Toward a geminal-model chemistry</i>
<b>S09 KS11</b> 16:00-16:15	<b><u>Joanna Jankowska</u></b> , Filip Sowiński <i>Dwufotonowa nieadiabatywna dynamika molekularna: wpływ drugiego wzbudzenia na mechanizm fotoprzełączania cykloheksadienu</i>
<b>S09 KS12</b> 16:15-16:30	<b><u>Adrianna Kruk</u></b> , Michał Lesiuk <i>Modelowanie widma fluorescencji indukowanej strumieniem protonów metodami chemii kwantowej</i>

## SESJA POSTEROWA

Wtorek, 19 września 2023 r.

Godzina: 17:00-18:00

**Wydział Nauk Ekonomicznych i Zarządzania, Hol**

Przewodniczący: prof. dr hab. Maciej Szaleniec oraz dr hab. inż. Mariusz Pawlak

- S09 P01** **Dominika Tabor**, Monika Srebro-Hooper  
FM  
*Kwantowo-chemiczna analiza oddziaływań międzycząsteczkowych w wybranych układach supramolekularnych"*
- S09 P02** **Edyta Słyk**, Łukasz Baran, Wojciech Rżysko  
*Samoorganizacja „kolorowych cząstek łącących”*
- S09 P03** **Damian Nowak**, Rafał Bachorz, Marcin Ratajewski, Joanna Pastwińska, Kaja Karaś, Iwona Karwaciak, Marcin Hoffmann  
FM  
*Zastosowanie uczenia maszynowego w przewidywaniu nowych ligandów do receptorów ROR $\gamma$ /ROR $\gamma$ T*
- S09 P04** **Kamil Wojtkowiak**, Aneta Jezierska  
FM  
*Podejście teoretyczne do opisu oddziaływań ligand-białko na przykładzie anhidraz węglanowych*
- S09 P05** **Emil Sujkowski**, Aleksandra Leszczyk, Katharina Boguslawski  
FM  
*Targeting open-shell compounds within pCCD using spin-flip-type methods*
- S09 P06** **Piotr Michalak**, Michał Lesiuk  
FM  
*Tucker decomposition in calculation of excitation energies of molecular systems*
- S09 P07** **Bartosz Szymański**, Rafał Madaj  
FM  
*Modelling the scope of laccase from *Trametes versicolor**
- S09 P08** **Lena Szczuczko**, Katharina Boguslawski  
FM  
*Devising a GUI for the PyBEST software*
- S09 P09** **Michaela Murzyniec**, Aleksandra Deptuch, James Hooper  
FM  
*Development and validation of computational models for tilted smectic phases with semi-empirical quantum methods*
- S09 P10** **Olga Żurowska**, Artur Michalak  
FM  
*Porównanie opisu wiązania chemicznego metodą ETS-NOCV z obrazem uzyskanym przy pomocy molekularnego potencjału elektrostatycznego*
- S09 P11** **Olga Żurowska**, Artur Michalak  
FM  
*Teoretyczne badania reakcji otwarcia epoksydu w procesie kopolimeryzacji epoksydów z CO $_2$  wobec nowego katalizatora Co(III) z ligandem salenowym*
- S09 P12** **Igor Sawicki**, Katharina Boguslawski  
FM  
*Excited states within the frozen-pair coupled-cluster formalism*
- S09 P13** **Jakub A. Warachim**, Robert W. Góra  
FM  
*Analiza dostępnych kanałów singletowych i trypletowych przebiegu reakcji fotocykloaddycji [2+2] podstawionego nitrostyrenu do indenu*

- S09 P14**      **Piotr Borowski**, Cristina Gila-Vilchez, Fernando González-Caballero, Miguel Alaminos,, Modesto T. López-López, Mariusz Barczak  
*Interactions between nanoparticles' functional groups and peptides in supramolecular magnetic hydrogels*
- S09 P15**      **Marta Galyńska**, Paweł Tecmer, Katharina Boguslawski  
*Fully relativistic quantum chemistry calculations of ytterbium cations*
- S09 P16**      **Kasper Witruk**, Tadeusz Andruniów, Róża Szweda  
*Analiza konformacyjna polimerów o zdefiniowanej sekwencji, skonstruowanych na abiotycznych łańcuchach, za pomocą metod dynamiki molekularnej*
- S09 P17**      **Kacper Cieślak**, Paweł Tecmer  
**FM**            *Implementation of effective core potentials in PyBEST*
- S09 P18**      **Julian Swierczyński**, Rahul Chakraborty, Paweł Tecmer  
**FM**            *Dipole and Quadrupole moments from the pCCD-based methods*
- S09 P19**      **Zygmunt Stoczewski**, Szczepan Roszak  
*Zastosowanie metod obliczeniowych w badaniu antocyjanidyn jako potencjalnych fotouczulaczy w ogniwach barwnikowych*