



## Sekcja So6

### Chemia teoretyczna, obliczeniowa i termodynamika

poniedziałek, 16 września 2024 r.

sala 4.28

#### Przewodniczący: Artur Michalak

---

<b>So6Wo1</b>	<u>Robert Hołyst</u>
14.00-14.30	<i>Global non-equilibrium thermodynamics: a new field in chemistry and physics</i>
<b>So6Wo2</b>	<u>Monika Musiał</u>
14.30-15.00	<i>Wieloreferencyjna metoda sprzężonych klasterów w sektorze trójwalencyjnym w zastosowaniu do opisu stanów elektronowych atomów i molekuł</i>
<b>So6Ko1</b>	<u>Tadeusz Hofman</u>
15.00-15.15	<i>Dwuparametrowe modele do opisu równowagi ciecz-ciecz w układach dwu – i trójskładnikowych</i>
<b>So6Ko2</b>	<u>Katarzyna Kaczmarek</u> , Paweł Gancarz, Edward Zorębski, Marzena Dzida
15.15-15.30	<i>Absorpcja ultradźwiękowa oraz termodynamiczna prędkość ultradźwięków w wybranych cieczach jonowych</i>
<b>So6Ko3</b>	<u>Alicja Mikłas</u>
15.30-15.45	<i>Modelowanie molekularne wybranych perowskitów do możliwych zastosowań w ogniwach fotowoltaicznych-badania teoretyczne</i>

---

#### Przewodniczy: Tadeusz Hofman

---

<b>So6Wo3</b>	<u>Artur Michalak</u> , Olga Żurowska, Mercedes Kukułka, Artur Michalak
16.15-16.45	<i>Theoretical description of chemical bonding based on the ETS-NOCV and deformation in molecular electrostatic potential</i>
<b>So6Wo4</b>	<u>Marek Królikowski</u> , Mikołaj Więckowski
16.45-17.15	<i>Otrzymywanie i właściwości termofizyczne ePCM – materiałów do magazynowania energii cieplnej</i>

---

<b>So6Ko4</b> 17.15-17.30	<u>Izabela Kurzydym</u> , Kacper Błaziak <i>Kinetyczna fragmentacja kwasu MBTcA – badanie procesów atmosferycznych z wykorzystaniem metod obliczeniowych DFT</i>
<b>So6FPo1</b> 17.30-17.35	<u>Krzysztof Cwynar</u> , Anna Kolanowska, Sławomir Boncel, Marzena Dzida <i>Funkcjonalizacja powierzchni nanorurek węglowych krokiem w kierunku ultranowoczesnych nanofluidów jonowych</i>
<b>So6FPo2</b> 17.35-17.40	<u>Karina Kowalska</u> , Teresa J. Bandosz, Dimitrios A. Giannakoudakis, Piotr Borowski, Mariusz Barczak <i>Zanieczyszczenia powietrza w pomieszczeniach zamkniętych – badania teoretyczne nad mechanizmem adsorpcji</i>
<b>So6FPo3</b> 17.40-17.45	<u>Olga Żurowska</u> , Mercedes Kukułka, Maria Różga, Artur Michalak <i>Teoretyczne modelowanie procesu degradacji kationów karbazoliowych w środowisku alkalicznym</i>
<b>So6FPo4</b> 17.45-17.50	<u>Adrian Racki</u> , Kamil Paduszyński <i>Zaawansowane Grafowe Sieci Neuronowe do Przewidywania Temperatury Topnienia Cieczy Jonowych: Integracja Najnowocześniejszych Techniki i Nowatorskich Metod Podziału Danych</i>

**wtorek, 17 września 2024 r.**

**sala 4.28**

**Przewodniczy: Marzena Dzida**

<b>So6Wo5</b> 13.45-14.15	<u>Jacek Czub</u> , Miłosz Wieczór, Kazi Amirul Hossain, Mateusz Kogut <i>Decoding Sequence-Specific Protein-DNA Interactions Using Molecular Dynamics</i>
<b>So6Wo6</b> 14.15-14.45	<u>Robert Szoszkiewicz</u> <i>Internal friction in folding/unfolding of short peptides and small proteins</i>
<b>So6Ko5</b> 14.45-15.00	<u>Damian Nowak</u> , Rafał Adam Bachorz, Karolina Babijczuk, La Ode Irman Jaya, Beata Jasiewicz, Lucyna Mrówczyńska, Marcin Hoffmann <i>Przewidywanie aktywności cytoprotekcyjnej związków indolowych za pomocą algorytmów uczenia maszynowego</i>
<b>So6Ko6</b> 15.00-15.15	<u>Kasper Witruk</u> , Róża Szweda, Tadeusz Andruniów <i>Wgląd w faldowanie oligouretanów metodami dynamiki molekularnej: wpływ długości łańcucha i stereosekwencji</i>

---

**So6Ko7** Krzysztof Cwynar, Anna Kolanowska, Katarzyna Kaczmarek, Sławomir Boncel, Marzena Dzida  
15.15-15.30 *Czy nanofluidy jonowe wykazują powiększoną izobaryczną pojemność cieplną? O poszukiwaniach Świętego Graala nanofluidów jonowych słów kilka*

---

**Przewodniczy: Robert Szoszkiewicz**

---

**So6Wo7** Marzena Dzida  
16.00-16.30 *Myślenie systemowe – od termodynamiki do nowoczesnego spojrzenia na otaczającą rzeczywistość*

---

**So6Wo8** Mariusz Michalczyk, Wiktor Zierkiewicz, Steve Scheiner  
16.30-17.00 *Refleksja nad wynikami analiz kwantowo-chemicznych w oparciu o badanie oddziaływań pomiędzy grupami metylowymi w homodimerach*

---

**So6FPo5** Alicja Miklas  
17.00-17.05 *Związki kompleksowe Cu(I) w sztucznej fotosyntezie-badania teoretyczne*

---

**So6FPo6** Beata Kizior, Aneta Jezierska, Wiktor Zierkiewicz  
17.05-17.10 *Teoretyczne badanie oddziaływań międzycząsteczkowych z udziałem atomu halogenu, chalkogenu bądź pnikogenu w kompleksach molekularnych Pd i Pt*

---

**So6FPo7** Kamil Wojtkowiak, Aneta Jezierska  
17.10-17.15 *Opis teoretyczny wiązań halogenowych w układach modelowych o znaczeniu biologicznym*

---

**So6FPo8** Brunon Pruski, Wojciech Jankowski, Renata Długosz, Marcin Hoffmann, Henryk Koroniak  
17.15-17.20 *Interactions of organic peroxides with plasticizers studied using DFT methods*

---

**So6FPo9** Dorota Rutkowska-Żbik  
17.20-17.25 *Zastosowanie metod topologii kwantowej do opisu stanów wzbudzonych porfiryn*

---

**środa, 18 września 2024 r.**

**sala 4.28**

**Przewodniczy: Renata Tokarz-Sobieraj**

---

**So6Wo9** Adam Kubas  
13.45-14.15 *Light perception and light generation: theoretical insights into retinoid (bio)chemistry and novel emitters for OLEDs*

---

<b>So6W10</b> 14.15-14.45	<u>Dorota Warmińska</u> , Łukasz Marcinkowski, Adam Kloskowski, Emil Szepiński, Maciej Śmiechowski <i>Densymetryczne i akustyczne badania solwatacji morfoliniowych cieczy jonowych w wodzie i rozpuszczalnikach organicznych</i>
<b>So6K08</b> 14.45-15.00	<u>Karina Kowalska</u> , Teresa J. Bandosz, Dimitrios A. Giannakoudakis, Piotr Borowski, Mariusz Barczak <i>Adsorpcja diklofenaku na funkcjonalizowanych powierzchniach grafenowych – badania teoretyczne</i>
<b>So6K09</b> 15.00-15.15	<u>Joanna Zams</u> , Marcin Andrzejak <i>Modelowanie kompleksów miedzi(I) jako molekularnych fotoczułaczy reakcji redukcji CO<sub>2</sub></i>
<b>So6K10</b> 15.15-15.30	<u>Paweł Rodziewicz</u> , Tobias Klöffel, Stanisław Popiel, Bernd Meyer <i>Analiza oddziaływań międzycząsteczkowych pomiędzy adamsytem oraz wodą na podstawie obliczeń DFT oraz symulacji metodą dynamiki molekularnej według Cara i Parrinello</i>

#### **Przewodniczy: Paweł Rodziewicz**

<b>So6W11</b> 16.00-16.30	<u>Renata Tokarz-Sobieraj</u> , Dorota Rutkowska-Zbik, Piotr Niemiec <i>Heteropolikwasy o strukturze Keggina na nośnikach tlenkowych. Obliczenia DFT</i>
<b>So6W12</b> 16.30-17.00	<u>Aneta Pobudkowska-Mirecka</u> , Agnieszka Śliwińska, Maciej Malinowski <i>Właściwości fizykochemiczne wybranych chinolonów w formie amoniowej cieczy jonowej</i>
<b>So6K11</b> 17.00-17.15	<u>Wojciech Jankowski</u> , Monika Bilska-Markowska, Marcin Kaźmierczak, Marcin Hoffmann <i>Obliczenia kwantowo-chemiczne stanów przejściowych reakcji difluorowanych akceptorów Michaela uszkanych podczas syntezy <math>\alpha</math>, <math>\beta</math>-nienasyconych fluorowanych i niefluorowanych amidów</i>

**czwartek, 19 września 2024 r.**

**sala 4.28**

#### **Przewodniczy: Marcin Hoffmann**

<b>So6W13</b> 13.45-14.15	<u>Marta Królikowska</u> , Michał Skonieczny <i>Charakterystyka płynów roboczych na bazie cieczy jonowych do zastosowań w agregatach absorpcyjnych</i>
------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

<b>So6W14</b> 14.15-14.45	<u>Mateusz Brela</u> , Yuliia Didovets, Alicja Miklas, Leszek M. Malec, Marek Boczar, <i>Badanie dynamiki sieci wiązań wodorowych w kryształach molekularnych metodami chemii kwantowej</i>
<b>So6K12</b> 14.45-15.00	<u>Karina Synowiec</u> , Marek Boczar, Jarosław Grolik <i>Badanie właściwości niesymetrycznie podstawionych 4,5-dialkoksy-2-nitroanilin za pomocą metod spektroskopowych i teoretycznych</i>
<b>So6K13</b> 15.00-15.15	<u>Maksymilian Szatko</u> , Sara Kozub, Tadeusz Andruniów, Róża Szweda <i>Badanie wpływu rozpuszczalników na struktury helikalne polimerów o zdefiniowanej sekwencji</i>