

S07

CHEMIA TEORETYCZNA I OBLICZENIOWA

Miejsce obrad Sala nr 4.27, poziom 2

Czwartek 22 września

Sesja 1 14:30 – 16:40

Przewodniczący Mariusz Bogacki / Marcin Hoffmann

- S07W01** 14:30 – 14:55
A. Sikorski, P. Polanowski
*Ruch w zatłoczonym środowisku – model błony komórkowej.
Symulacja komputerowa*
- S07K01** 14:55 – 15:10
I. Gulaczyk, M. Kręglewski
*Energie rotacyjno-wibracyjne pierwszego wzbudzonego stanu
torsyjnego w cząsteczce metyloaminy*
- S07K02** 15:10 – 15:25
M. Brela, A. Michalak
*Theoretical analysis of ion-polymer interactions in PBI-based
membranes*
- S07K03** 15:25 – 15:40
A. Ignaczak, Ł. Orszański
*Zastosowanie metod obliczeniowych do badania właściwości
heptakis(2,6-di-O-metylo)- β -cyklodekstryny*
- S07K04** 15:40 – 15:55
A. Jezuita, K. Ejsmont, T.M. Krygowski, H. Szatyłowicz
*Fizyczna interpretacja efektu podstawnikowego: meta i para –
podstawione pochodne nitrobenzenu*

- S07K05** 15:55 – 16:10
K. Salus, D. Pluskota-Karwatka, T. Siodła, M. Hoffmann
Rotational barrier in adenine-N-acetylcysteine cross-links generated by mutagenic aldehydes: DFT and AIM studies
- S07K06** 16:10 – 16:25
W. Jankowski, M. Hoffmann
Can Google Searches Predict the Popularity and Harm of Psychoactive Agents
- S07K07** 16:25 – 16:40
M. Makowski, A. Głębocka, R. Ganzynkiewicz, A. Liwo
Potencjał opisujący oddziaływania pomiędzy O-fosforylowanymi aminokwasami z modelami hydrofobowych łańcuchów bocznych reszt aminokwasowych w wodzie

ESJA POSTEROWA

S07P01-S07P17

Czwartek 22 września, 17:00 – 18:00

Miejsce Korytarz prawy, poziom 0

- S07P01** R. Ganzynkiewicz, A. Głębocka, A. Liwo, M. Makowski
Potencjał oddziaływań pomiędzy O-fosforylowaną tyrozyną z modelami polarnych łańcuchów bocznych reszt aminokwasowych w wodzie
- S07P02** A. Chudoba, Z. Flisak, S. Roszak
Pochodne tiofenu jako prekursory polimerów przewodzących
- S07P03** G. Karpińska, J.C. Dobrowolski
Substituent effect on imidazole and benzimidazole N-oxides. A computational study
- S07P04** D. Piotrowski, M.R. Sundberg, K. Zborowski
Teoretyczne badania możliwości tworzenia trwałych kompleksów metanu z wybranymi siarczanami(VI) metali dwuwartościowych

- S07P05** K. Gąssowska, M.R. Sundberg, M. Etiene, K. Zborowski
Teoretyczne badania oddziaływań cyklopropanu z wybranymi jonami metali
- S07P06** K. Pustuła, M. Makowski
Teoretyczny opis pirolizy 3-oksetanonu
- S07P07** B. Gostyński, M. Cypryk
Podstawienie nukleofilowe na atomie krzemu w rozpuszczalniku – modelowanie metodą ONIOM
- S07P08** E. Słyk, W. Rżysko, P. Bryk
Struktura i przemiany fazowe w monowarstwach kopolimerów blokowych
- S07P09** M. Breła
Analiza wiązań wodorowych za pomocą numerycznego rozwiązywania równania Schrödingera dla ruchu protonów
- S07P10** A. Kasperski, P. Szabelski
Wpływ stopnia pokrycia powierzchni i temperatury na stabilność dwuwymiarowych sieci molekularnych złożonych z cząsteczek krzyżowych
- S07P11** M. Adamiak, A. Ignaczak
Badania teoretyczne właściwości 1,10-N,N'-Bis-(β-D-mocznikoglukopiranozylo)-4,7,13-trioksa-1,10-diazacyklopentadekanu
- S07P12** K. Ciura, P. Lodowski
Właściwości kwasowo-zasadowe imidazolu i kwasu salicylowego w świetle obliczeń metodą funkcjonałów gęstości
- S07P13** A. Woszczyk, P. Szabelski
Indukowanie i wzmacnianie segregacji cząsteczek o trwałym momencie dipolowym w chiralnych warstwach zaadsorbowanych
- S07P14** D. Pluskota-Karwatka, D. Jarmużek, M. Hoffmann, T. Pędziński, K. Salus
Mechanism of fluvastatin photodegradation: DFT studies
- S07P15** D. Jarmużek, K. Salus, M. Hoffmann, D. Pluskota-Karwatka
DFT-GIAO calculations in structural studies of substituted etheno adducts of adenine nucleosides

S07P16

M. Leszczyńska, K. Ejsmont

Wpływ efektu podstawnikowego na zmianę aromatyczności w serii pochodnych karbazolu

S07P17

M. Kazmierczyk, M. Hoffmann, L. Rychlewski

Analiza genomów ludzkich przy pomocy programowalnych układów logicznych