

Sekcja S03 Chemia Fizyczna i Teoretyczna
Opiekun sekcji: prof. dr hab. Władysław Rudziński

Miejsce obrad: Aula A, Duża Chemia

Poniedziałek, 19.09.2011

Przewodniczący sesji: prof. dr hab. Krzysztof Woliński

- 16.30 – 16.55 **W1** prof. Pulay Peter, University of Arkansas, Fayetteville
Generalized multipole moments and polarizabilities, and their use in ultrafast quantum mechanics/molecular mechanics monte carlo simulation of solutions
- 17.00 – 17.25 **W2** prof. Baker Jon, University of Arkansas, Fayetteville
New chemical structures using enforced geometry optimization
- 17.30 – 17.55 **W3** prof. Renata Tokarz-Sobieraj, IKiFP PAN, Kraków
Properties of Active Centers in Heteropolyacids with Different Central Ions. Cluster DFT Calculations
- 18.00 – 18.15 **K1** dr Borowski Piotr, UMCS, Lublin
On the Theoretical Determination of Vibrational Spectra of Silicon-Containing Compounds
- 18.15 – 18.30 **K2** dr Gulaczyk Iwona, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Poznań
Pasmo rozciągające C-N cząsteczki metyloaminy w widmie w podczerwieni o wysokiej rozdzielczości
- 18.30 – 18.45 **K3** Zielińska Anna, UMCS, Lublin
Efekty rozpuszczalnikowe w spektroskopii azotowego rezonansu magnetycznego

Wtorek, 20.09.2011

Przewodniczący sesji: prof. dr hab. Bronisław Jańczuk

- 10.30 – 10.55 **W4** prof. Bravo-Diaz Carlos, Universidad de Vigo, Vigo-Pontevedra
Determining the distribution of antioxidants between the oil, water, and interfacial regions of model food emulsions
- 11.00 – 11.25 **W5** prof. Emil Chibowski, UMCS, Lublin
Surface free energy and topography of solid supported phospholipid layers
- 11.30 – 11.45 **K4** dr Krawczyk Joanna, UMCS, Lublin
Krytyczne napięcie powierzchniowe zwilżania skóry ludzkiej
- 11.45 – 12.00 **K5** dr hab. Jolanta Narkiewicz-Michałek, UMCS, Lublin
Badania utleniania witaminy C tlenem atmosferycznym w roztworach micelarnych
- 12.00 – 12.15 **K6** Szeląg Małgorzata, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Poznań
Teoretyczne badanie struktury i właściwości antyoksydacyjnych kwasu alfa-liponowego
- 12.15 – 12.30 **K7** dr hab. Szymula Marta, UMCS, Lublin
Elektrochemiczne badania aktywności przeciwutleniaczy w układach micelarnych

Przewodniczący: dr hab. Tomasz Pańczyk

- 16.30 – 16.55 **W6** prof. Bald Adam, Uniwersytet Łódzki, Łódź
Znaczenie asocjacji jonowej w badaniach parametrów fizykochemicznych roztworów elektrolitów
- 17.00 – 17.25 **W7** prof. Dobrowolski Jan Czesław, Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa
On chirality of amino acids
- 17.30 – 17.55 **W8** dr Zborowski Krzysztof, Uniwersytet Jagielloński, Kraków
Kompleksy metanu z jonami metali grup IA i IIA układu okresowego

- 18.00 – 18.15 **K8** dr Fekner Zygmunt, UMCS, Lublin
Chronopotencjometria cykliczna różniczkowa odwrotna z programowanym prądem w badaniach układów adsorpcyjnych
- 18.15 – 18.30 **K9** mgr Kinart Zdzisław, Uniwersytet Łódzki, Łódź
Przewodnictwo elektryczne wodnych roztworów kwasów karboksylowych i ich różnych soli sodowych
- 18.30 – 18.45 **K10** mgr Stawowska Katarzyna, Politechnika Łódzka, Łódź
Reakcje flawonoidów z kwasem chlorowym (I) oraz nadtlenoazotynem i jednym z produktów jego rozkładu, ditlenkiem azotu
- 18.45 – 19.00 **K11** mgr Banasiak Ewa, Politechnika Łódzka, Łódź
Wpływ flawonoidów na reakcje hemoglobiny z kwasem chlorowym (I): Badania kinetyczne

Środa, 21.09.2011

Miejsce obrad: Sala 104, Wydział Ekonomii

Przewodniczący sesji: prof. Lucyna Hołysz

- 10.30 – 10.55 **W9** prof. Sokołowski Stefan, UMCS, Lublin
Unusual mechanism of capillary condensation in pores modified with chains forming pillars
- 11.00 – 11.15 **K12** prof. Choma Jerzy, WAT, Warszawa
Otrzymywanie właściwości i zastosowanie nanostruktur krzemionkowo-metalicznych
- 11.15 – 11.30 **K13** mgr Agnieszka Knyś-Dzieciuch, UMCS, Lublin
Zastosowanie pakietu oprogramowania Gromacs do symulacji metodami dynamiki molekularnej
- 11.30 – 11.45 **K14** dr Marczewski Adam, UMCS, Lublin
Equilibrium and kinetics of dilute solute adsorption from aqueous solution within the Langmuir theory
- 11.45 – 12.00 **K15** dr Sławomir Ostrowski, Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa
Chiralne Diazafullereny
- 12.00 – 12.15 **K16** dr hab. Pańczyk Tomasz, IkiFP PAN, Kraków
Crucial prerequisites for a functional magnetically triggered nanocontainer
- 12.15 – 12.30 **K17** dr hab. Paweł Szabelski, UMCS, Lublin
Theoretical modeling of the chiral separation in adsorbed overlayers

Czwartek, 22.09.2011

Sesja posterowa – 10.30 – 12.30

Hall, Duża Chemia

1. Bald Adam
Badania densymetryczne wpływu temperatury i ciśnienia na funkcje termodynamiczne mieszanin wody z di-, tri- i tetraetylenoglikolem
2. Belica Sylwia
Oddziaływania wybranych dwupetydów z mocznikiem w wodzie w 298,15 K
3. Belica Sylwia
Termodynamika oddziaływań awidyny z biotyną oraz jej pochodnymi
4. Białopiotrowicz Tomasz
Mixed starch-gelatin films and their wettability
5. Błachnio Magda
Ocena właściwości adsorpcyjnych węgla aktywnych w usuwaniu zanieczyszczeń pestycydowych z roztworów wodnych
6. Bocian Szymon
Zastosowanie pomiarów mikrokalorymetrycznych do charakteryzowania powierzchni adsorbentów i wypełnień chromatograficznych
7. Bravo-Diaz Carlos
Reactivity control by micellar aggregates: Inhibition of the reaction between 4-nitrobenzenediazonium ions and hydrophilic aminoacids
8. Brudnik Katarzyna
Badania kinetyki reakcji dichlorometanu i D-dichlorometanu z atomami chloru w fazie gazowej

9. Brzyska Agnieszka
Computational analysis of the solvent effect on the ¹⁵N NMR spectra in pyridine and 2,6-di-tert-butylpyridine molecules
10. Cichosz Marcin
Rozdzielanie mieszaniny H₂O-BuOH metodą perwaporacji próżniowej na membranach uformowanych z PDMS
11. Cypryk Marek
Kwantowo-mechaniczna natura kwasów tiosulfonowych
12. Czech Kamil
Zależność właściwości sorpcyjnych haloizytu od rodzaju aktywacji kwasowej
13. Dobrowolski Jan Czesław
On chirality transfer in electron-donor-acceptor complexes
14. Fekner Zygmunt
Transformacje krzywych chronopotencjometrycznych i ich użyteczność w badaniach elektrochemicznych
15. Gluza Karolina
Badania teoretyczne mechanizmu kompleksowania dioli przez aminofosfoniany funkcjonalizowane ugrupowaniem boronowym
16. Gryboś Robert
Symulacje DFT mechanizmu NO-SCR w mordenicie dotowanym palladem
17. Hołysz Lucyna
Wettability and topography of cholesterol layers
18. Jamiola dominik
Otrzymywanie pretopodobnych struktur krzemionkowo-złoty
19. Jańczuk Bronisław
Właściwości powierzchniowe i objętościowe alkoholi krótkołańcuchowych
20. Jedynak Katarzyna
Synteza i właściwości mezoporowatych węgli z cząstkami złota
21. Jęzak Sylwia
The effect of temperature on thermodynamic and acoustic properties of flavor-active ester, ethyl caprylate
22. Jodkowski Jerzy
Badania kinetyki reakcji jodometanu i fluorometanu z atomami chloru w fazie gazowej
23. Jodłowski Grzegorz
Analiza termodynamiczna izoterm sorpcji par węglowodorów alifatycznych, cyklicznych i homologów benzenu na próbkach węgla kamiennych
24. Jodłowski Grzegorz
Gazopojemność wyrobiska kopalni z punktu widzenia sekwestracji – analiza za pomocą modelu termodynamicznego
25. Jurak Małgorzata
Effect of vitamin E on properties of model membranes
26. Karpińska Grażyna
Hydroxyquinolines: constitutional isomers and tautomers
27. Karpińska Grażyna
On substituent effect in the 7-position on the 1,3-dihydro-benzo[e][1,4]diazepin-2-one system
28. Kinart Zdzisław
Dielektryczne badania mieszanin woda - glikol dietylenowy
29. Knyś-Dzieciuch Agnieszka
Wykorzystanie dynamiki molekularnej do badania oddziaływań międzycząsteczkowych na przykładzie układu CD44-hialuronan
30. Kosmulski Marek
Surface-induced electrolytic dissociation
31. Krasiński Grzegorz
Analiza ścieżek fragmentacji izomerycznych pochodnych imidazlidyno-2-tionu metodą funkcjonalów gęstości
32. Krasiński Grzegorz
Modelowanie molekularne hydrolizy pochodnych tlenków fosfin katalizowanej enzymem CAL-B
33. Krawczyk Joanna
Właściwości adsorpcyjne i agregacyjne wybranych surfaktantów kationowych stosowanych w kosmetyce
34. Lupa Łukasz
Double ionization potential equation-of-motion coupled cluster method for potential energy curve production: example of the 1,2-diazene molecule
35. Marczevska-Boczkowska Krystyna
Korozja stali w zawierających wodę i/lub chlorki tetrafluoroboranach dialkiloimidazoliowych
36. Marczewski Adam
Comparison of theoretical and empirical equations of solute adsorption kinetics from aqueous solutions
37. Michta Anna
Brak efektów samorganizacji izotopowej H/D pomiędzy wiązaniami wodorowymi w kryształach molekularnych

38. Możejko Janina
Termiczne zachowanie osadów ściekowych z ZCh "Police"
39. Myśliwiec Dawid
Przegląd prostych teoretycznych modeli magnetyzmu pod kątem możliwości ich zastosowania w chemii
40. Nieszporek Krzysztof
Application of the Local Composition Theory to describe adsorption of gases on real solid surfaces
41. Niewiadomski Piotr
Estryfikacja kwasu akrylowego alkoholem 2-etyloheksylovym w obecności katalizatorów heterogenicznych. Badania kinetyczne i termodynamiczne
42. Nosal-Wiercińska Agnieszka
Adsorpcja tiomocznika i jego metylowych pochodnych na granicy faz rtęć/roztwór wodny chloranów (VII); zależność od stężenia elektrolitu podstawowego
43. Nosal-Wiercińska Agnieszka
Wpływ cystyny na parametry warstwy podwójnej granicy faz rtęć/chlorany (VII) w roztworach o różnej aktywności wody
44. Olszówka Marta
EOM-CC study of the low-lying excited states of the hydrogen peroxide molecule
45. Pietras-Oźga Dorota
Micelarna chromatografia cieczowa jako metoda służąca do oceny właściwości lipofilowych pestycydów
46. Podkościelny Przemysław
Adsorpcja fenoli z roztworów wodnych na heterogenicznych powierzchniach węgla aktywnych oraz aktywnych włókien węglowych
47. Saba Jadwiga
Etapowa elektroredukcja jonów Zn^{2+} w obecności soli sodowej kwasu 1-dekanosulfonowego w funkcji temperatury
48. Saba Jadwiga
Wpływ tetrametylotiomocznika na elektroredukcję jonów Zn^{2+} w obecności soli sodowej kwasu 1-dekanosulfonowego
49. Siepietowski Łukasz
N-metyloamino- pochodne 2-trimetylogermano-5-acetylotiofenu – analiza za pomocą metod DFT
50. Smykowski Daniel
Influence of extra-framework cations in ZSM-5 zeolite structure on adsorption of carbon dioxide: theoretical study
51. Smykowski Daniel
Zeobuilder module for generating random host-guest configurations and examples of potential applications
52. Szczęś Aleksandra
Wpływ pH, temperatury i siły jonowej roztworu na stabilność liposomów
53. Szczęś Aleksandra
Wpływ stałego pola magnetycznego na właściwości wody i roztworów elektrolitów
54. Szymczyk Katarzyna
Właściwości wodnych roztworów trójskładnikowych mieszanin związków powierzchniowo czynnych na granicy faz woda-powietrze
55. Szymczyk Katarzyna
Zwilżanie polimerów przez wodne roztwory trójskładnikowych mieszanin związków powierzchniowo czynnych
56. Świątkowski Andrzej
Ocena możliwości jednoczesnego wyznaczenia izoterm adsorpcji monochlorofenoli i wybranych herbicydów z roztworów wodnych na węglu aktywnym
57. Świątkowski Andrzej
Regeneracja sorbentu Cr-Cu-Ag/węgiel aktywny poprzez utlenianie mieszaniną H_2O_2/O_3
58. Terpiłowski Konrad
Wpływ chemicznej modyfikacji powierzchni stopów na ich zwilżalność i swobodną energię powierzchniową
59. Trela Joanna
Adsorpcja puryny i adeniny na powierzchni miedzi
60. Tyl Aleksandra
Wpływ przejścia fazowego na widma w podczerwieni kryształów 4-pirydonu
61. Uber Dorota
Foldability of two peptides derived from β -hairpins of 1E0L protein (WW domain)
62. Zborowski Krzysztof
Równowagi tautomeryczne w układzie alfa-tropolonu
63. Zdziennicka Anna
Wzajemny wpływ bromku cetylotrimetyloamoniowego i alkoholi krótkołańcuchowych na ich właściwości powierzchniowe i objętościowe
64. Żamojć Krzysztof
A fluorescence spectroscopic study of the interactions between 2-hydroxy-biphenyl and nitrogen dioxide
65. Żamojć Krzysztof
Stop flow study on neuroprotective effect of 2-ketobutyrate on HT-22 cells challenged with hydrogen peroxide

66. Karoń Krzysztof
Wpływ elektrochemicznej polimeryzacji na właściwości elektrochemiczne i spektralne wybranych pochodnych karbazolu
67. Słota Agata
Kinetyka adsorpcji białek na materiałach węglowych
68. Drach Mateusz
Solubilization of small molecules by surfactant micelles