

I науковий семінар “Молекулярне моделювання структури перспективних органічних сполук”

На кафедрі фізики НФаУ спільно зі співробітниками кафедри медичної хімії пройшов I науковий семінар “Молекулярне моделювання структури перспективних органічних сполук”, присвячений пошуку єдиного наукового напрямку для двох фундаментальних кафедр Національного фармацевтичного університету.

Були заслухані наступні доповіді:

1. Єршоміна Ганна Олександрівна “Пошук біологічно активних речовин серед похідних 1,3-тіазолу”.
2. Шейкіна Надія Валеріївна “Проміжний звіт щодо молекулярного моделювання таутомерів 1, 1A і 1B за допомогою програми GAUSSIAN W09”.
3. Красовський Ігор Вячеславович “Технічні можливості програми GAUSSIAN W09. Перспектива подальшої співпраці”.

На семінарі були присутні:

Доктор фармацевтичних наук, професор, зав. каф. медичної хімії НФаУ Перехода Л.О.,

Доктор фіз.-мат. наук, професор, в.о. зав. каф. фізики НФаУ Стороженко І.П.,

Кандидат фіз.-мат. наук, професор Тіманюк В.О.,

Доктор фіз.-мат. наук, професор Кокодій М.Г.,

Кандидат фармацевтичних наук, доцент Подольський І.М.,

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент Решетняк Ю.Б.,

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент Багуля В.О.,

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент Кайдаш М.В.,

Кандидат фіз.-мат. наук Баранник М.О.

Запропоновані доповіді були рекомендовані до друку у виданнях, акредитованих ВАК НАН України.

У результаті проведеного заходу були обрані функціонали, базиси і середовища для математичних розрахунків термодинамічних показників 1, 1A, 1B таутомерних форм 1,3-тіазолу в програмі GAUSSIAN W09.

