

Dr. sc. Borislav Kovačević  
Grupa za računalne bioznanosti  
Zavod za fizičku kemiju  
Institut Ruđer Bošković  
Bijenička cesta 54  
10000 Zagreb  
Tel: (01)-4561-111

Hrvatsko kemijsko društvo  
Horvatovac 102a  
10000 Zagreb

Zagreb, 6. rujna 2017.

**Predmet:** Godišnji izvještaj rada Sekcije za teorijsku i računalnu kemiju Hrvatskog kemijskog društva

Poštovani članovi Hrvatskog kemijskog društva,

U razdoblju od protekle godišnje skupštine HKD-a, rad Sekcije za teorijsku i računalnu kemiju manifestirao se prvenstveno kroz održavanje predavanja. 28. lipnja održana je mini konferencija o računalnom proučavanju mehanizama radikalskih enzima. U sklopu te mini konferencije predavanja su održali:

1. Dr. Christof Jäger "Radical SAM enzymes for biotechnology"
2. Dr. Christian Wick "Modelling the reactions catalysed by coenzyme B<sub>12</sub>-dependent enzymes: Accuracy and cost-quality balance"
3. Mag. chem. Marko Hanževački "The influence of chemical change on protein dynamics: A case study with pyruvate formate-lyase"

Ostala predavanja održana u okviru Sekcije:

4. Dr. Anna Maria Maciolek „Effective pair potentials and collective behaviors of colloids in near-critical solvents” 11. travnja 2017.
5. Dr. Piotr Nowakowski „Critical casimir forces between defects in 2d ising mode” 11. travnja 2017.
6. Dr. sc. Jurica Novak „Fotokemija 1- i 2-naftola i njihovih klastera s vodom” 25. travnja 2017.
7. Marko Tomin, mag. chem. „Usporedba dipeptidil peptidaza iii iz mezofilne i termofilne bakterije” 4. srpnja 2017.
8. Domagoj Fijan, mag. chem. „Thermodynamic anomalies and network topology in liquids” 12. srpnja 2017.
9. Fabijan Pavošević, mag. chem. „Explicitly correlated methods for large molecular systems” 6. rujna 2017..

Dr. sc. Borislav Kovačević  
Predsjednik Sekcije za teorijsku i računalnu kemiju HKD-a