



LATVIJAS UNIVERSITĀTE
**ĶĪMIJAS
FAKULTĀTE**

NOSLĒGUMA SEMINĀRS

2019. gada 29. novembrī Latvijas Universitātes Zinātņu mājā, 801. auditorijā

Projekts: Integrētas eksperimentālās un datormodelēšanas pētīšanas metodikas pilnveide farmaceutiski aktīvo cietvielu fāžu īpašību un daudzveidības paredzēšanai.

Projekta īstenotājs: *Dr. chem.* Toms Rēķis, LU Ķīmijas fakultātes Fizikālās ķīmijas katedra.

Projekta mecenāts ir SIA "Mikrotīkls", ziedojumu pārvalda Latvijas Universitātes fonds.

Programma:

14.00 – 14.15 **Semināra atklāšana**

14.15 – 14.35 **Agris Bērziņš**: A combined spectroscopic and computational study of association of 2-chloro-4-nitrobenzoic acid in solution.

14.35 – 14.45 **Aija Trimdale**: Use of computationally obtained association Gibbs energies to substantiate the outcome of the crystallization.

14.45 – 15.05 **Ilze Grante**: Exploration of protonation of tyrosine kinase inhibitors via complementary use of UV/Vis spectroscopy and DFT calculations.

15.05 – 15.25 **Artis Kons**: Polymorphism of R-Encenicline Hydrochloride: Access to the Highest Number of Structurally Characterized Packing Polymorphs Using Desolvation of Various Solvates.

15.25 – 16.00 **László Fábián**: Solvates in transition.

16.00 – 16.20 **Pārtraukums**

16.20 – 16.40 **Kristīne Krūkle-Bērziņa**: Solvent-Induced Single-Crystal to Single-Crystal Transformation of Non-toxic γ -Cyclodextrin-K Organic Framework.

16.40 – 17.15 **Mihails Arhangel'skis**: Ab initio crystal structure prediction of metal-organic frameworks.

17.15 – 17.35 **Toms Rēķis**: Crystallization of Chiral Molecular Compounds: What Can Be Learned from the Cambridge Structural Database?

17.35 – 18.10 **Dejan-Krešimir Bučar**: Synthons and solid solutions: through the looking-glass, and what we have yet to find there.