



## IZVJEŠTAJI SA SKUPOVA

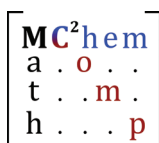


Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu  
Institut Ruđer Bošković  
Međunarodni sveučilišni centar (IUC) u Dubrovniku

Inter  
University  
Centre  
Dubrovnik



## Izvešće



## Math/Chem/Comp 28 – 2016

### 28<sup>th</sup> MC<sup>2</sup> Conference

20. – 25. lipnja 2016.  
Dubrovnik • Hrvatska

#### || H. Vančik\*

Kemijski odsjek  
Prirodoslovno-matematički fakultet  
Sveučilište u Zagrebu  
Horvatovac 102a  
10 000 Zagreb

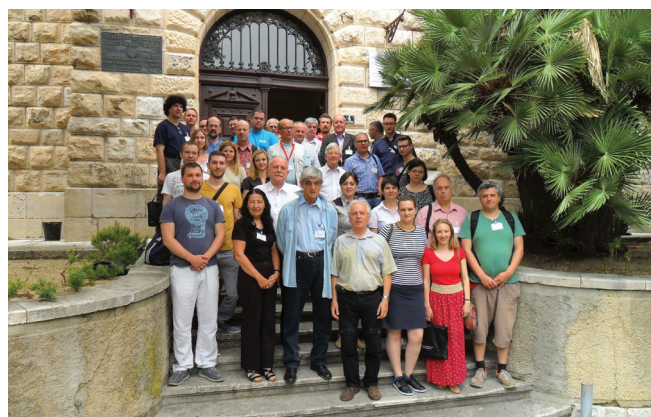
Međunarodni znanstveni skup *MathChemComp* (*Mathematics-Chemistry-Computers*), tradicionalno se održao u lipnju (od 20. do 25.) u Dubrovniku u Međunarodnom sveučilišnom centru IUC. Konferencija je okupila znanstvenike iz prirodoslovlja i matematike: fizičare, kemičare i matematičare, pa tako nastavlja dugu tradiciju još od 1986. godine, kada je prvobitno bila zamišljena kao susret znanstvenika koji se bave matematičkom kemijom, poglavito teorijom grafova. Ove su godine na Skupu bila nazočna 54 sudionika iz Njemačke, Engleske, Španjolske (Katalonija), Mađarske, Slovenije, Srbije, Poljske, Austrije i Hrvatske.

Temeljna ideja Konferencije bila je povezati istraživanja računalnog modeliranja, teorije grafova, kemijsku topologiju, dakle, interdisciplinarna istraživanja koja uključuju fiziku i kemiju te znanost o materijalima.

Konferenciju je organizirao Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu, njegov Kemijski odsjek, a u suradnji s Institutom Ruđer Bošković i Međunarodnim sveučilišnim centrom (IUC) u Dubrovniku.

Predsjednici skupa bili su profesor Hrvoj Vančik s PMF-a u Zagrebu i profesor Jerzy Cioslowski sa Sveučilišta u Szczecinu u Poljskoj.

Prvi dan Simpozija bio je posvećen osamdesetom rođendanu akademika Nenada Trinajstića, jednog od utemeljitelja kvantne kemije u Hrvatskoj i kemijske teorije grafova kao nove znanstvene discipline. Akademik Trinajstić, kao jedan od osnivača ovog znanstvenog skupa, održao je uvodno predavanje o povijesti istraživanja na tom području u Hrvatskoj, kao i o prvim danima konferencije *MathChemComp*.



Slika 1 – Sudionici skupa 28. MCC (u sredini: akademik Nenad Trinajstić i prof. dr. sc. Hrvoj Vančik)

U okviru Skupa održana je i posebna sekcija posvećena spektroskopiji NMR, za čiju su se organizaciju pobrinuli profesori Predrag Novak i Dražen Vikić-Topić.

U skladu s tom tradicijom, znanstveni program obuhvatio je ne samo teoriju grafova, već je bio proširen i na nove teme, posebice iz područja molekulske i kvantne dinamike, modeliranje kondenzirane faze, te matematičke reprezentacije makromolekula i molekularnih agregata.

Prema tradiciji, *MathChemComp* nije samo znanstveni skup, već obuhvaća i tečajeve iz različitih područja posebno organiziranih za napredne studente, pretežno doktorskih i specijalističkih studija. Ove godine to je bio tečaj iz područja molekulske dinamike kojega je održao profesor Tomica Hrenar s Kemijskog odsjeka PMF-a u Zagrebu.

U završnoj raspravi razmatrani su i oblici i tematika za iduću konferenciju *MathChemComp*. Sljedeći simpozij *MathChemComp* održat će se također u središtu IUC u Dubrovniku od 19. do 24. lipnja 2017. godine.

Posebnu zahvalnost Organizator duguje sponzorima: Alpha-Chrom, JEOL, Bruker Italia, Messer Croatia, Centar za NMR Instituta Ruđer Bošković, Kemijski odsjek PMF-a u Zagrebu i Zaklada Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti.

\* Prof. dr. sc. Hrvoj Vančik, predsjednik Skupa  
e-pošta: vancik@chem.pmf.hr