

**Katedra chemie Přírodovědecké fakulty UJEP**

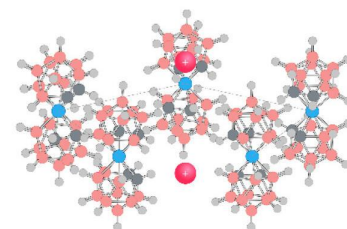
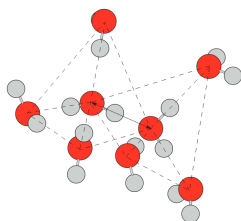
zve studenty, akademiky a odbornou veřejnost na přednášku

## ***The use of quantum chemical calculations on selected examples***

kterou přednese vážený host

**prof. Tomáš Urbič**

z Univerzity v Lublani ve Slovinsku.



Termín a místo konání:

**1. listopadu 2022 ve 12:00**

(konec do 13:00 včetně diskuse)

**učebna CP--1.18 v budově CPTO**

Anotace přednášky:

*Ab initio quantum mechanical methods have been used to predict properties of matter and chemical reactions on atomic level. We will show how the quantum chemistry methods can be used to assess the effect of local environment on interaction between water molecules and structures of simple clusters of water, ammonia, and HF. We will also show how different kinds of ions bind to graphene. Finally, usage of ab initio methods for structures of COSAN ion will be demonstrated.*