

## Katedra fyziky Vás zve na přednášku

### *Mikroskopická struktura a dynamika vodných roztoků elektrolytů pohledem molekulárních simulací*

**RNDr. Jan Dočkal, Ph.D.**

z Katedry Fyziky, Přírodovědecká fakulta, UJEP

**Kdy:** čtvrtek **26. října 2023 od 13 h**

**Kde:** zasedací místnost 2.32, budova CPTO

**Anotace:** Pomocí molekulárních simulací se za použití nejlepších současných modelů podíváme na mikroskopickou strukturu a dynamiku vodných roztoků elektrolytů a to především z hlediska hydratace různých iontů a sítě mezimolekulárních vazeb na celé škále koncentrací. Blíže si představíme důvody, proč různé experimentální metody udávají velmi odlišná hydratační čísla jednotlivých iontů a prozkoumáme, zda existují pravidla obecného charakteru, která by dokázala popsat hydrataci různých typů iontů především za vyšších koncentrací, kde již nelze předpokládat úplnou disociaci iontů ve vodě.

Zve Vás Mgr. Stanislav Pařez, Ph.D.  
vedoucí semináře