



INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

projekt
„Pokročilé vzdělávání ve výzkumu a aplikacích nanomateriálů“

pořádá Workshop

"KVANTOVÁ DYNAMIKA A MEZIMOLEKULOVÉ INTERAKCE "

Molekulová dynamika se za posledních 20 let stala základním prostředkem k simulacím chemických reakcí, vlastností kapalin či biomolekul. První část Workshopu se bude zabývat otázkou, jak simulovat chemické děje, jestliže nelze zanedbat kvantovou povahu atomových jader. Tak je tomu nejen u povýtce kvantových fenoménů jako je tunelování, ale také při interakci molekul s kvantovými objekty (spektroskopie) nebo při popisu přeskoků mezi elektronovými stavy (fotochemie). Důraz bude kladen zejména na simulaci fotochemických dějů z prvotních principů.

Cílem druhé části Workshopu bude uvést účastníky do současných technik molekulového modelování a naznačit jejich použití pro předpověď vlastností nanomateriálů. Workshop se zaměří na slabé mezimolekulární interakce u uhlíkových nanostruktur a na modelování sorpce nejrůznějších molekul jak na povrchu tak mezi vrstvami grafenu. Zmíněny budou techniky kvantové mechaniky, empirické a semiempirické metody

přednášející:

- RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.
- RNDr. Petr Jurečka, Ph.D.

pátek 23. října 2009, 9 hod. SEČ

**PC učebna (místnost 3.002) Přírodovědecká fakulta UPOL
tř. 17. listopadu 12, Olomouc**

Vyplněnou přihlášku, kterou naleznete na adrese nanosystemy.upol.cz, zašlete nejpozději **do 15. října** na adresu nanosystemy@upol.cz (omezená kapacita).

více informací získáte na: nanosystemy.upol.cz



TENTO PROJEKT JE SPOLUFINANCOVÁN EVROPSKÝM SOCIÁLNÍM FONDEM A STÁTNÍM ROZPOČTEM ČESKÉ REPUBLIKY.