



Izvješće o radu

Sekcije za teorijsku i računalnu kemiju HKD

dr. sc. Borislav Kovačević

(12. rujna 2017. – 21. rujna 2018.)



May 12, 2018

Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Zagreb,
Horvatovac 102a, Zagreb, Croatia





Organizacija:

- Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
- Institut Ruđer Bošković, Zagreb
- Hrvatsko kemijsko društvo

Sponzori:



Organacijski odbor: Darko Babić, Danijela Barić, Marko Cvitaš, Ines Despotović, Nađa Došlić, Marko Hanževački, Tomica Hrenar, Boris Kovačević, Ivan Ljubić, Zlatko Mihalić and Robert Vianello.

Lokalni organizacijski odbor: Tomica Hrenar, Marija Bakija, Ana Mikelić, Nina Tokić, Lujo Matasović, Karlo Sović, Ivana Nikšić-Franjić, Luka Bilić and Marin Sapunar.



- **Uvodna riječ:**



- > 70 učesnika
- 9 predavanja - predavači s različitih institucija (IRB, PMF, SRCE, FBF, Fidelta)
- 20 postera



Ostala održana predavanja:

Datum	Predavač/ica	Naslov predavanja
17. 10. 2017.	Dr. Aleksandra Maršavelski	Ispitivanje selektivnosti homologa seril-tRNA sintetaze i inhibicije smještanja acila u hidrofobni džep proteina ACP
14. 11. 2017.	Dr. Weiwei Xie	Accuracy of trajectory surface-hopping methods: Test for a two-dimensional model of the photodissociation of phenol
21. 11. 2017.	Antonio Prlj, mag. chem.	Towards efficient perovskite solar cells: optimizing hole transport Materials
30. 11. 2017.	Prof. dr. Nađa Došlić	Fotokemija bioorganskih sustava: teorija i eksperiment
8. 12. 2017.	Prof. dr. Zlatko Bačić	Explaining the symmetry breaking observed in the solid endohedral fullerenes H ₂ @C ₆₀ , HF@C ₆₀ , and H ₂ O@C ₆₀
1. 2. 2018.	Prof. dr. Daniele Toffoli	DFT/TDDFT modeling of molecular electronic excited states: photoemission and NEXAFS studies
1. 2. 2018.	Dr. Shota Tsuru	Ultrafast X-ray photoelectron diffraction from gas-phase isolated molecules
15. 2. 2018.	Dr. Attila Tajti	Coupled cluster methods for excited electronic states
13. 6. 2018.	Dr. Peter Georgiev	Neutron scattering and modelling studies of hydrogen in materials for gas storage and catalysis