



prof. RNDr. René Kalus, Ph.D.

Působnost ve vědních oborech:

Molekulové simulace, metody (neadiabatické) molekulové dynamiky, metody Monte Carlo.

Nabízená témata pro PŘ na AR23/24:

Modelování transportních vlastností argonu ve vzduchu
Diabatizace elektronových bází metodami umělé inteligence

Údaje o předchozím odborném působení mimo VŠB-TUO:

1987 – 1991, Ústav teorie hutnických procesů ČSAV, Ostrava, asistent
1991 – 2010, Ostravská univerzita, odborný asistent, docent

Školitelem od roku: 2010

Počet úspěšně obhájených disertačních prací:

2 – školitel specialista
4 – školitel (z toho 2 práce v režimu *cotutelle* ve spolupráci s *Université Toulouse III – Paul Sabatier*, Francie)

Obor habilitačního řízení: Fyzikální chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Praha, 2005

Obor profesorského řízení: Aplikovaná fyzika, Univerzita J. E. Purkyně, Ústí nad Labem, 2020

Ohlasy publikace (WOS/Scopus): 706/718

H – index: 14

Přehled nejvýznamnějších publikačních a tvůrčích činností za posledních 5 let

- Plasma Sources Sci. Technol. 27 (2018) 065005, C. Van de Steen, M. Benhenni, R. Kalus, B. Lepetit, F.X. Gadéa, M. Yousfi, *Quantum and semi-classical collision cross-sections and transport data for a Kr⁺/Kr system*.
- Plasma Sources Sci. Technol. 28 (2019) 095008, C. Van de Steen, M. Benhenni, R. Kalus, F.X. Gadéa, M. Yousfi, *Mobility and dissociation of electronically excited Kr²⁺ ions in cold krypton plasma*.
- J. Phys. Chem. A 124 (2020) 4036, A. Vitek, D.J. Arismendi-Arrieta, M. Šarmanová, R. Kalus, R. Prosmiiti, *Finite Systems under Pressure: Assessing Volume Definition Models from Parallel-Tempering Monte Carlo Simulations*.
- Chem. Phys. 549 (2021) 111261, M. Ončák, R. Ćosić, R. Kalus, *Modeling of photoabsorption spectra of small helium cluster cations through ab initio and semi-empirical approaches. A comparative study*.
- Phys. Chem. Chem. Phys. 24 (2022) 6915, A. Vitek, R. Kalus, *Thermodynamics of small mercury clusters and the role of electronically excited states: a case study on Hg₁₃*.

Spolupráce se zahraničím:

Université Toulouse III – Paul Sabatier, Francie (Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques, Laboratoire Plasma et Conversion d'Énergie, Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité)
Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid, Španělsko
Akademia J. Dlugosza, Czestochowa, Polsko (Instytut Fizyki)

 studijni.feiv@vsb.cz

 feivsb.cz