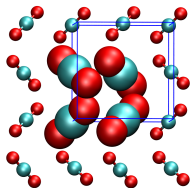


Molekulární krystaly a kvantová mechanika

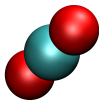
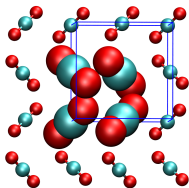
Jiří Klimeš, Katedra chemické fyziky a optiky



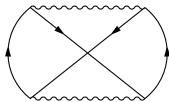
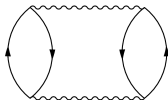
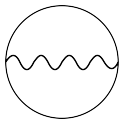
$$E_{\text{bind}} = E_{\text{solid}}/N - E_{\text{mol}}$$

Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, Katedra chemické fyziky a optiky

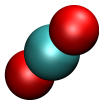
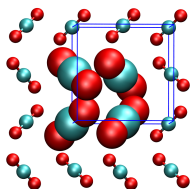


$$E_{\text{bind}} = E_{\text{solid}}/N - E_{\text{mol}}$$



Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, Katedra chemické fyziky a optiky



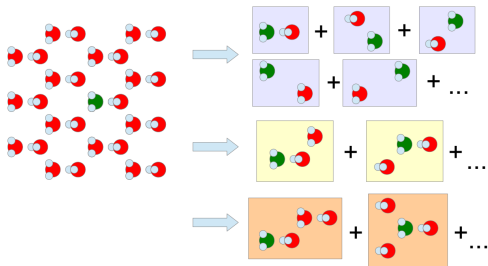
$$E_{\text{bind}} = E_{\text{solid}}/N - E_{\text{mol}}$$

Výzvy:

- Mnohoelektronový problém na pomezí fyziky pevných látek a kvantové chemie.
- Vazebné energie malé a citlivé na metodu (teoretickou i výpočetní).

Téma 1: Vazebné energie spolehlivě

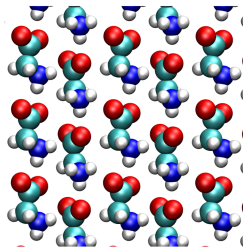
- Cíl: Pro vysoce přesnou metodu porovnat MBE s periodickými výsledky a zajistit shodu.
- Konkrétně pro CCSD.



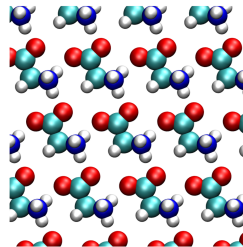
Hofierka, Klimeš: Electron. Structure **3**, 034010 (2021)

Téma 2: Spolehlivé rozdíly energií polymorfů

- Cíl: získat spolehlivé, ale upočitatelné nastavení MBE pro výpočet rozdílu energií polymorfů a fází.



Glycine γ



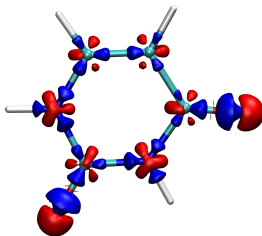
Glycine β

Hunnisett et al.: Acta Cryst. **B80** 548 (2024)

Téma 3: Přesnost pseudopotenciálů a metody PAW

Možné cíle:

- Vývoj specifického modelu pro vodu.
- Odvození přesného PAW dvouatomového členu.
- ...



Yourdkhani, Klimeš: J. Chem. Theory Comput. **19** 8871 (2023)

Nabízíme:

- Získání znalosti programů pro kvantově-mechanické výpočty jak pro pevné látky tak i pro molekuly.
- Vývoj vlastních programů (Fortran, Python, ...).
- Přístup k superpočítačovému prostředí (Linux, bash, ...).

U témat lze upravit množství odvozovacích, analytických a implementačních složek.

Nabízíme:

- Získání znalosti programů pro kvantově-mechanické výpočty jak pro pevné látky tak i pro molekuly.
- Vývoj vlastních programů (Fortran, Python, ...).
- Přístup k superpočítačovému prostředí (Linux, bash, ...).

U témat lze upravit množství odvozovacích, analytických a implementačních složek.



$
IT4I
@&01

meta**centrum**
cesnet



Děkuji za pozornost