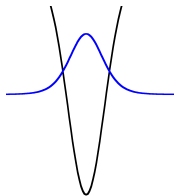


Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KChFO, jiri.klimes@matfyz.cuni.cz

Molekulární krystaly a kvantová mechanika

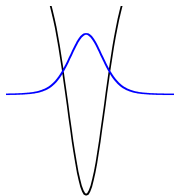
Jiří Klimeš, KChFO, jiri.klimes@matfyz.cuni.cz



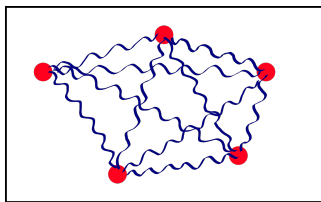
$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r)$$

Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KChFO, jiri.klimes@matfyz.cuni.cz



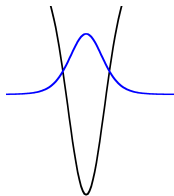
$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r)$$



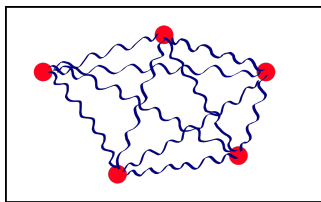
$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \sum_i V(r_i) + \sum_{i < j} \frac{C}{r_{ij}}$$

Molekulární krystaly a kvantová mechanika

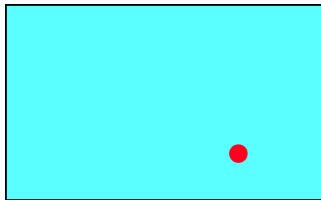
Jiří Klimeš, KChFO, jiri.klimes@matfyz.cuni.cz



$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r)$$

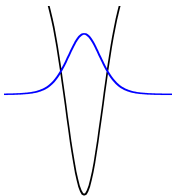


$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \sum_i V(r_i) + \sum_{i < j} \frac{C}{r_{ij}}$$

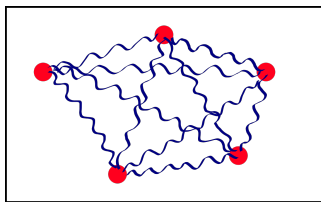


Molekulární krystaly a kvantová mechanika

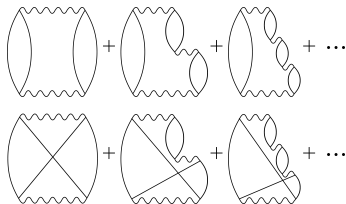
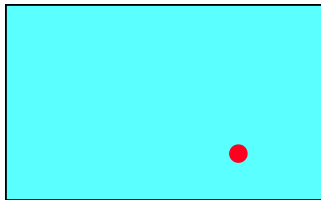
Jiří Klimeš, KChFO, jiri.klimes@matfyz.cuni.cz



$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r)$$

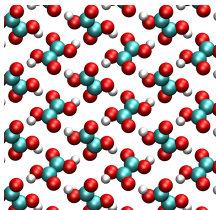


$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \sum_i V(r_i) + \sum_{i < j} \frac{C}{r_{ij}}$$



Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KChFO, jiri.klimes@matfyz.cuni.cz

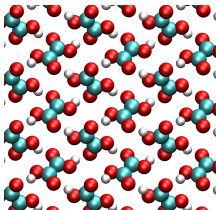


Kyselina šťavelová

- Vazebná energie: $E_{\text{krystal}}/N - E_{\text{molekula}}$
- Vývoj metod, studium jejich přesnosti a spolehlivosti.
- Snaha dosáhnout vysoké přesnosti (několik %).

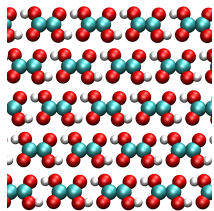
Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KChFO, jiri.klimes@matfyz.cuni.cz



Kyselina šťavelová α

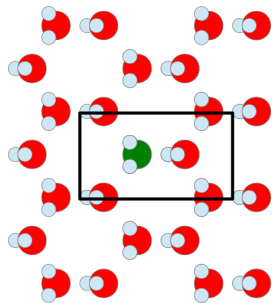
- Vazebná energie: $E_{\text{krystal}}/N - E_{\text{molekula}}$
- Vývoj metod, studium jejich přesnosti a spolehlivosti.
- Snaha dosáhnout vysoké přesnosti (několik %).



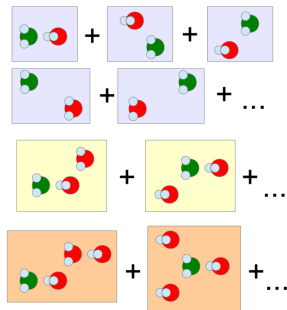
Kyselina šťavelová α

- Polymorfy a fáze: různé krystaly téže látky.
- E_{α} vs. E_{β} .
- Fázové diagramy. Stabilita léčiv.

Používané přístupy



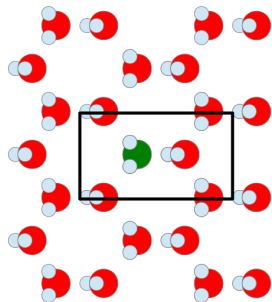
Periodické okrajové podmínky



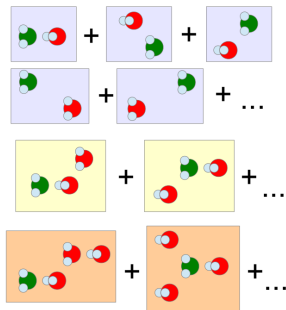
Klastrové výpočty

Oba přístupy by měly dát stejný výsledek!

Používané přístupy



Periodické okrajové podmínky



Klastrové výpočty

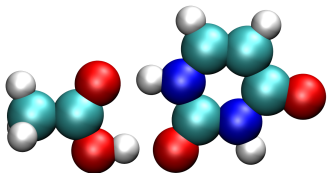
Oba přístupy by měly dát stejný výsledek!

Další možnosti výpočtů:

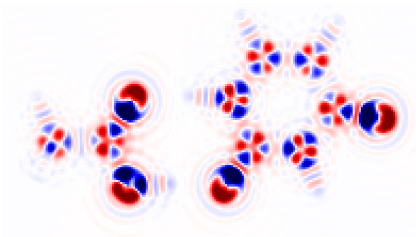
- Vliv teploty a tlaku (vhodné využít strojového učení).
- NMR spektra, vibrační spektra, dynamika, ...

Analýza chyb elektronové hustoty

- Přibližné metody → chyby elektronové hustoty.
- Chyba elektronové hustoty → chyba energie.
- Můžeme počítač chyby naučit a korigovat je?
- Možné zrychlení výpočtů o řády, např. u molekulární dynamiky.



Dimer kys. octové a uracilu



Chyba hustoty způsobená pseudopotenciálem

Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KCHFO, jiri.klimes@matfyz.cuni.cz

Nabízíme:

- Získání znalosti programů pro kvantově-mechanické výpočty.
- Vývoj vlastních programů (Fortran, Python, ...).
- Přístup k superpočítačovému prostředí.



Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KCHFO, jiri.klimes@matfyz.cuni.cz

Nabízíme:

- Získání znalosti programů pro kvantově-mechanické výpočty.
- Vývoj vlastních programů (Fortran, Python, ...).
- Přístup k superpočítačovému prostředí.



Děkuji za pozornost