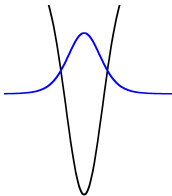


Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KChFO, klimes@karlov.mff.cuni.cz

# Molekulární krystaly a kvantová mechanika

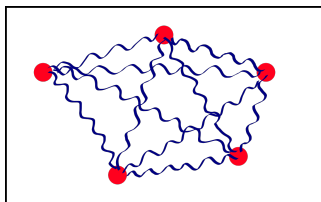
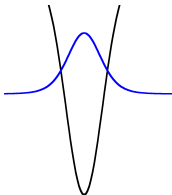
Jiří Klimeš, KChFO, klimes@karlov.mff.cuni.cz



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

# Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KChFO, klimes@karlov.mff.cuni.cz

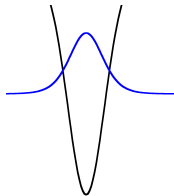


$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r)$$

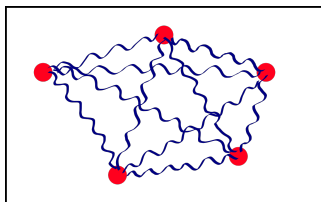
$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \sum_i V(r_i) + \sum_{i < j} \frac{C}{r_{ij}}$$

# Molekulární krystaly a kvantová mechanika

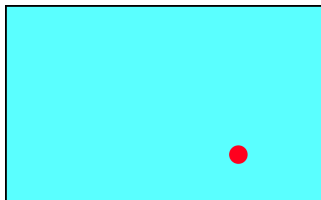
Jiří Klimeš, KChFO, klimes@karlov.mff.cuni.cz



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

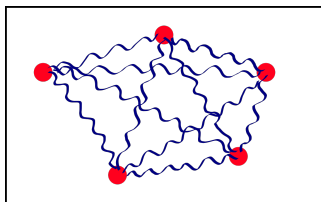
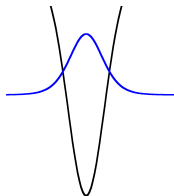


$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \sum_i V(r_i) + \sum_{i < j} \frac{C}{r_{ij}}$$



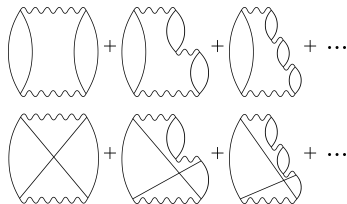
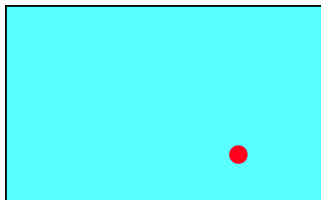
# Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KChFO, klimes@karlov.mff.cuni.cz



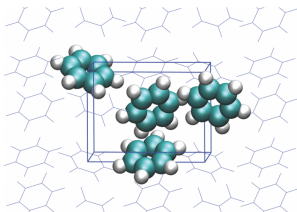
$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r)$$

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



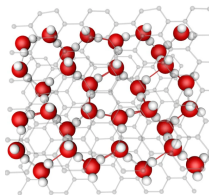
# Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KChFO, klimes@karlov.mff.cuni.cz



Krystal benzenu

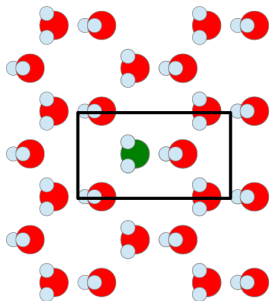
- Vazebná energie:  $E_{\text{krystal}}/N - E_{\text{molekula}}$
- Vývoj metod, studium jejich přesnosti a spolehlivosti (ERC grant APES).



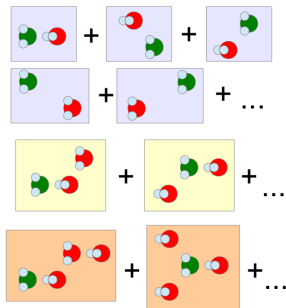
2D led

- Spolupráce s experimentátory.
- Kvant.-mech. výpočty, molekulární dynamika.
- Ferroelektrický 2D led v grafenu: Chin et al., Nat. Comms. (2021)

# Projekt 1: Elektrostatické mezimolekulární interakce



Periodické okrajové podmínky

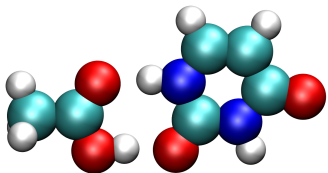


Klastrové výpočty

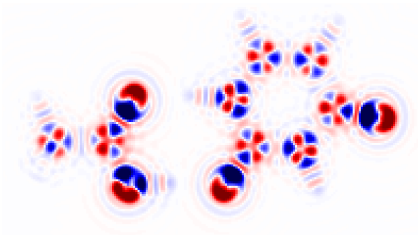
- Oba přístupy by měly dát stejný výsledek!
- Elektrostatické interakce důležité i mezi vzdálenými fragmenty.

## Projekt 2: Analýza chyb elektronové hustoty

- Chyba elektronové hustoty  $\rightarrow$  chyba energie.
- Můžeme počítač chyby naučit?
- Možné zrychlení výpočtů o řád.



Dimer kys. octové a uracilu

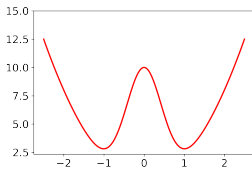
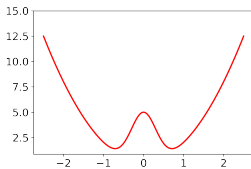
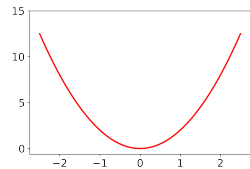
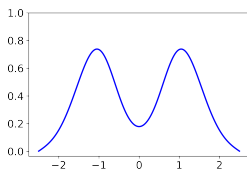
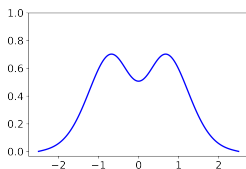
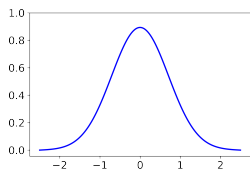


Chyba hustoty způsobená pseudopotenciálem



# Projekt 3: Kvantové chování vodíku

- Vodík se často chová jako kvantová částice.
- Implementace 1D a 3D Sch. rovnice pro vodík v reálných systémech (kristaly léčiv, vysokotlaké fáze).



Vlnové funkce získané řešením Sch. rovnice pro různé potenciály.

# Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KCHFO, klimes@karlov.mff.cuni.cz

Nabízíme:

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



# Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, KCHFO, klimes@karlov.mff.cuni.cz

Nabízíme:

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



Děkuji za pozornost