

Nabídka Studentských fakultních grantů pod vedením Dr. Klimeše

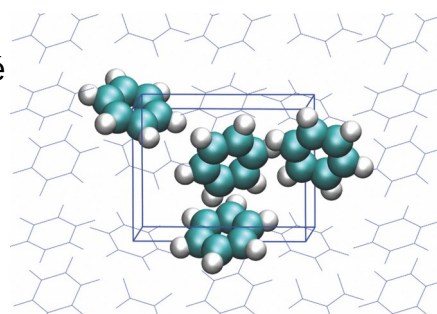
Katedra chemické fyziky a optiky

[Nabídka na webu: kelum.matfyz.cz/theses.html](http://kelum.matfyz.cz/theses.html)

V naší skupině používáme metody založené na kvantové mechanice k výpočtu vlastností molekul a pevných látek. Zajímá nás hlavně vazebná energie, tedy energie uvolněná při vzniku vazeb mezi molekulami. K náročným výpočtům používáme superpočítače a práci s nimi je možné si v rámci projektů osvojit.

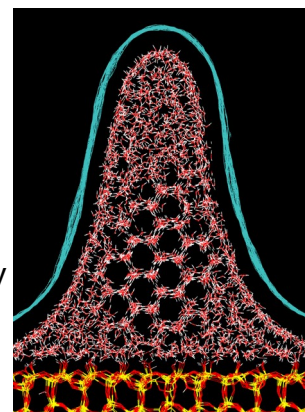
Použití neuronových sítí pro popis interakcí mezi molekulami

Výpočty vazebných energií mezi molekulami bývají výpočetně náročné. Když jsou vzdálenosti mezi molekulami velké, je možné energii jejich interakce popsat pomocí klasické elektrostatiky. Tedy jako interakci dipólů, kvadrupólů a vyšších momentů. V projektu vyjdeme z tohoto klasického popisu a upravíme jej tak, aby umožňoval přesný popis i pro malé vzdálenosti molekul.



Mrznutí vody v nano-měřítku

O vodě víme, že mrzne při 0 stupních Celsia. Nicméně teplota tání vody, která je prostorově omezená na škále nanometrů, může být až o desítky stupňů nižší. Takováto voda se vyskytuje v přírodě a setkáme se s ní i v experimentu. Příkladem je voda mezi grafenem a povrchem křemene na obrázku napravo. Jední z mnoha problémů studia omezené vody pomocí počítačových simulací je její pomalá krystalizace, tedy přechod z kapaliny do krystalické formy. V projektu vyzkoušíme, zda je možné krystalizaci urychlit použitím zárodečných krystalů.



Tunelování vodíku

Vodík je nejlehčí z prvků a často tak u něj můžeme pozorovat "kvantové" chování, tedy například průchod bariérou a rozmazání polohy. Tento efekt je častý i pro vodíky, které se účastní vodíkových vazeb mezi molekulami. Pochopení chování vodíku je velmi důležité např. pro farmaceutický průmysl, ale standardní metody používané v současnosti nám dávají rozporuplné výsledky. V projektu použijeme vysoce přesné metody pro výpočet potenciálu, ve kterém se vodík pohybuje a zhodnotíme přesnost jednodušších metod.

