

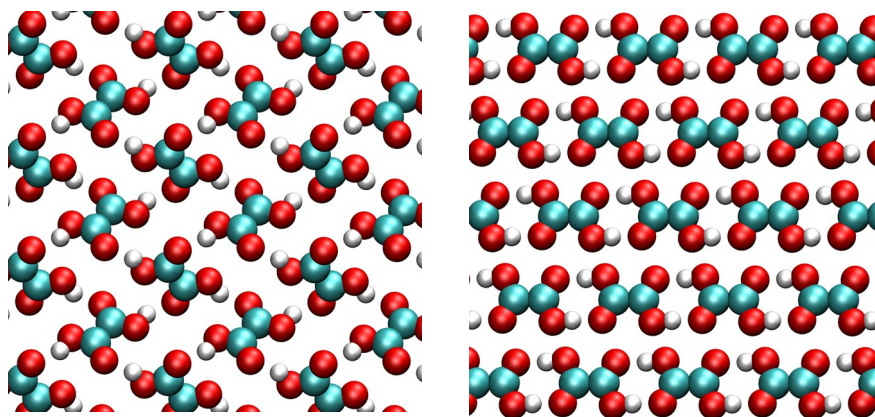
Výpočty rozdílů energií polymorfních krystalů

Vedoucí projektu: doc. Mgr. Jiří Klimeš PhD

Fázový diagram látky nám říká, jaká fáze je stabilní při dané teplotě a tlaku. Existuje ale mnoho látek, které kromě stabilní krystalické fáze mohou tvořit metastabilní krystaly. Tedy jedna sloučenina může mít i při stejné teplotě a tlaku různé krystalické struktury. Tento jev se označuje jako polymorfismus. Příkladem látky vykazující polymorfismus je kyselina šťavelová, jejíž α a β polymorfy jsou znázorněny na Obr. 1. Určení všech možných polymorfů dané látky je velmi důležité pro farmaceutický průmysl, neboť polymorfy mají často velmi odlišné fyzikální vlastnosti. Pro studium polymorfismu se v současnosti úspěšně používají přístupy založené na počítačových simulacích krystalů. V prvním kroku je možné vytvořit v počítači velké množství možných struktur. Dalším krokem je porovnání jejich energií. Struktura s nejnižší energií je předpokládané globální minimum, struktury s vyšší energií jsou možné polymorfy. Často následují další kroky, ve kterých je energie části možných polymorfů zpřesňována pomocí přesnějších metod kvantové mechaniky [1].

V projektu použijeme počítačové simulace využívající základní metody kvantové mechaniky mnoha částic. První částí projektu bude tedy seznámení se s programy, které se pro simulace používají. Dále otestujeme vliv numerických parametrů na rozdíl energií polymorfů vybrané látky. To nám umožní identifikovat nastavení, které bude dávat spolehlivé energetické rozdíly. Nastavení dále ověříme pro další látky vykazující polymorfismus, například ty studované v rámci evropské sítě BEST-CSP (Bringing Experiment and Simulations Together in Crystal Structure Prediction).

[1]: Lily M. Hunnisett et al., *The Seventh Blind Test of Crystal Structure Prediction: Structure Ranking Methods*, Acta Cryst. B80, (2024)



Obr. 1: Části struktur dvou polymorfů kyseliny šťavelové.