

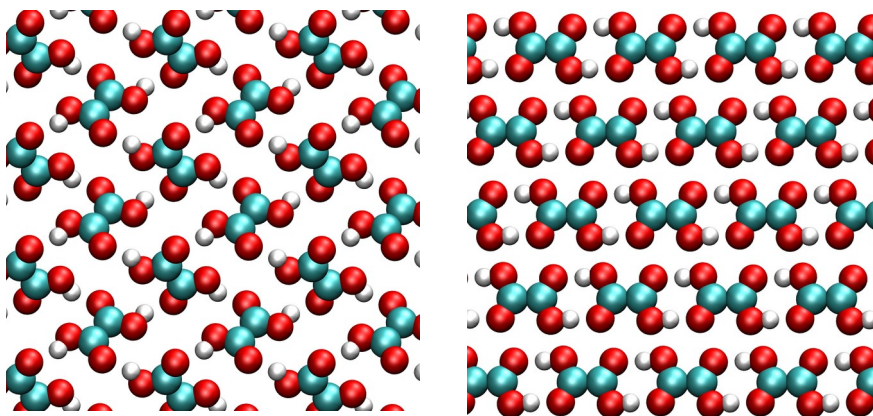
Algoritmy pro generování možných polymorfů látek

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 předpovězené 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.

V projektu bude implementován jednoduchý algoritmus sloužící k vytvoření různých krystalových struktur dané látky. Pro optimalizace struktury a výpočty energií použijeme velmi rozšířenou knihovnu Atomic Simulation Environment. Energie vypočteme pomocí klasických silových polí a metod založených na strojovém učení. Výsledky porovnáme s daty dostupnými v literatuře.

[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.