

Studium dynamiky vody pomocí počítačových simulací

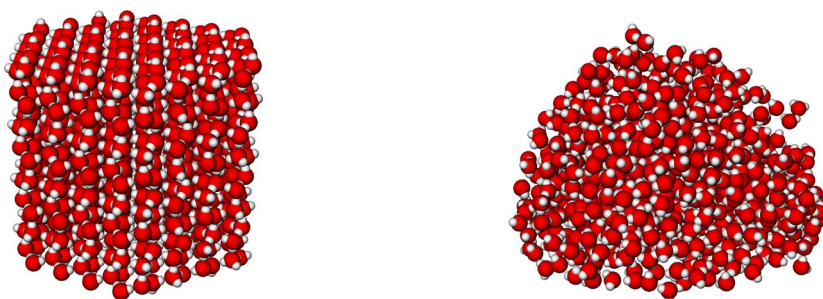
Vedoucí projektu: doc. Mgr. Jiří Klimeš PhD

Voda je jedna z nejdůležitějších přírodních látek a studiu jejích vlastností bylo věnováno obrovské množství výpočetního času. Základní vlastností kapalné vody je její struktura, například nás zajímá jaká je nejpravděpodobnější vzdálenost mezi dvěma kyslíky nebo kolika vodíkových vazeb se v průměrně jedna molekula účastní. Pro studium dynamiky můžeme použít různé metody, od jednoduchých a výpočetně nenáročných modelů, které používají analytické funkce pro popis vazeb, až po metody využívající kvantovou mechaniku pro elektrony i jádra. Předpovědi různých metod se přitom mohou v detailech lišit [1]. Často se ale detaily struktury liší i pokud použijeme stejný teoretický model, ale jiné numerické nastavení. Tento krok se často dělá kvůli snížení výpočetních nároků. Jedním z takových nastavení jsou pseudopotenciály (PPs), které nám umožňují zanedbat silně vázané elektrony blízko jader, jejichž vliv na dynamiku je minimální. Použití PPs ale způsobuje chybu ve vazebné energii a je zásadní otázkou, zda tato chyba ovlivní strukturní vlastnosti vody. Navíc jsme v naší skupině vyvinuli přístup, který umožňuje chybu PPs korigovat, a mohli bychom tedy otestovat jeho účinnost pro studium dynamiky vody [2].

V projektu budou provedeny výpočty molekulární dynamiky kapalné vody pomocí různých nastavení pomocí standardních metod založených na kvantové mechanice. Dále provedeme analýzu chyb PPs pomocí výpočtů na dvojicích a trojicích molekul a otestujeme přesnost modelu korigujícího chybu.

[1] Lin *et al.*: *J. Chem. Theory Comput.* **8**, 3902 (2012)

[2] Yourdkhani & Klimes: *J. Chem. Theory Comput.* **19**, 8871 (2023)



Obr. 1: Model krystalu vody a kapalné vody získaný pomocí molekulární dynamiky. Video dostupné na kanálu @icelcn na [YouTube \(odkaz\)](#).