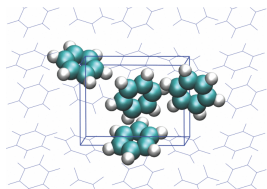
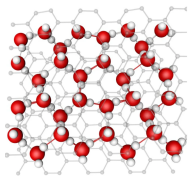


# Molekulární krystaly a kvantová mechanika

Jiří Klimeš, Katedra chemické fyziky a optiky



Krystal benzenu

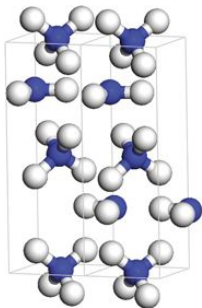


2D led

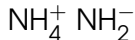
- Vazebná energie:  $E_{\text{krystal}}/N - E_{\text{molekula}}$
- Je třeba použít kvantovou mechaniku.
- Problém: " $\infty$ " elektronů  $\rightarrow$  různé aproximace
- Vývoj metod, studium jejich přesnosti a spolehlivosti.
- Spolupráce s experimentátory.
- Kvant.-mech. výpočty, molekulární dynamika.
- Ferroelektrický 2D led v grafenu: Chin et al., Nat. Comms. (2021)

# Projekt 1: Přesnost aproximací Sch. rovnice

- "Exotické" molekulární krystaly jsou vhodné ke studiu přesnosti aproximací Schrödingerovy rovnice.
- Poruchová teorie do  $n$ -tého řádu, teorie funkcionálu hustoty.



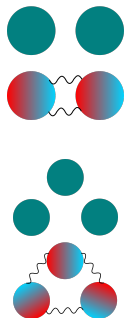
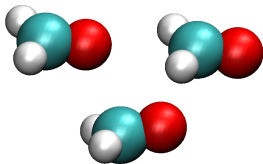
Iontová fáze amoniaku



Modrzejewski, Yourdkhani, Klimes, J. Chem. Theory Comput. 16, 15587 (2020)

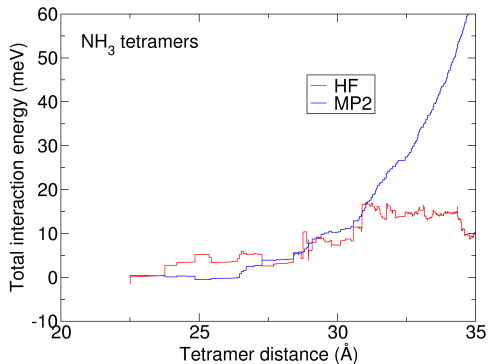
## Projekt 2: Modely tříčasticových korelací

- Poruchová teorie do druhého řádu je relativně přesná.
- Nepopisuje korelace třech elektronů.
- Poruchová teorie vyšších řádů výpočetně náročná → model.



# Projekt 3: Hartree-Fock v quadruple precision

- Vazebné energie jsou rozdíly energií – citlivé na přesnost.
- Jaké jsou chyby např. diagonalizace, maticového násobení, ... ?



## Nabízíme:

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



Nabízíme:

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



Děkuji za pozornost