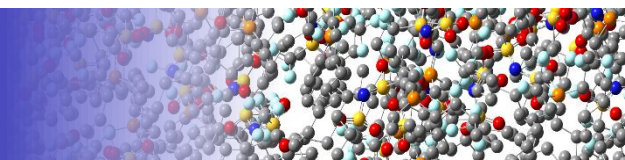
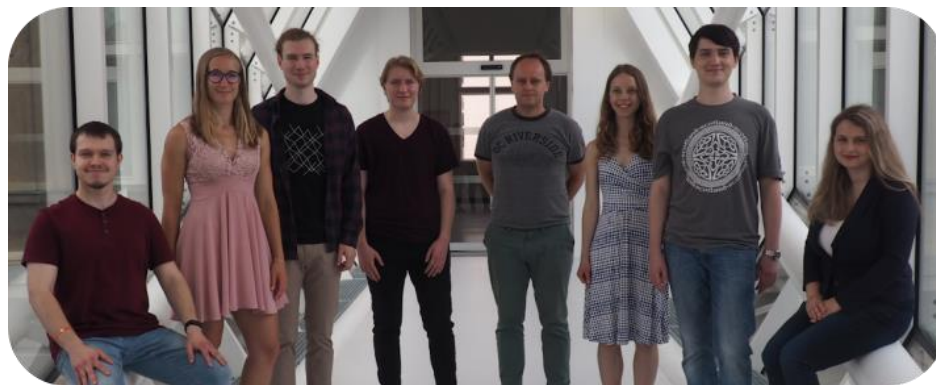
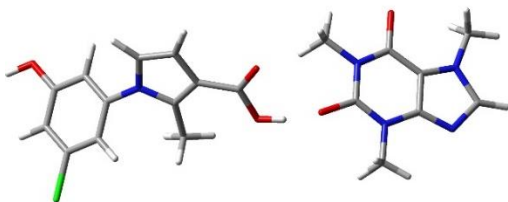


Doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Ing. Martin Klajmon, Ph.D.



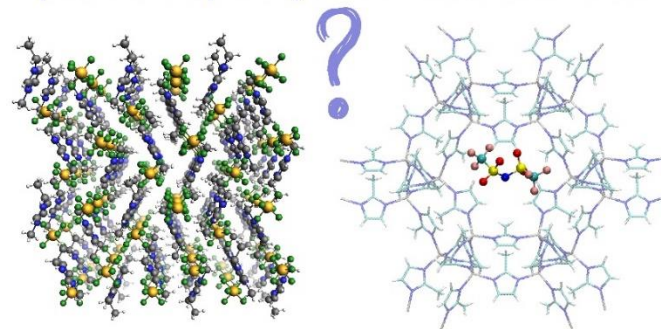
vlastnosti a interakce
jednotlivých molekul



různé výpočetní
techniky a modely



(makroskopické) vlastnosti **materiálů**



Aplikačně zajímavé látky

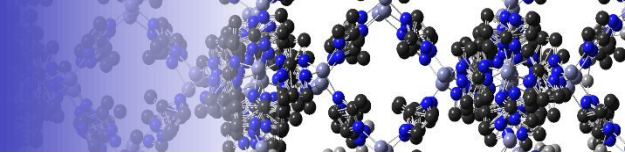
Organické polovodiče
Aktivní farmaceutické látky
(Bio)polymery
Zelená rozpouštědla

Metody výpočetní chemie = *in silico*

Kvantová mechanika
Molekulární simulace
COSMO
„Engineering-like“ modely
Strojové učení (ML)

Materiálový výzkum a design procesů

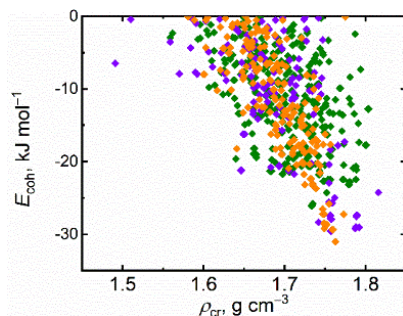
Hustoty
Teplota a entalpie tání
Těkavost
Fázové diagramy
Rozpustnost a afinita



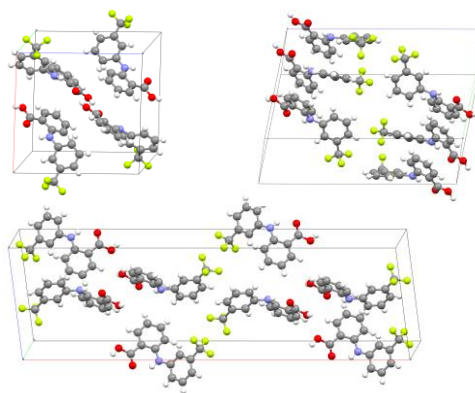
Polymorfismus = existence různých krystalových struktur pro danou látku



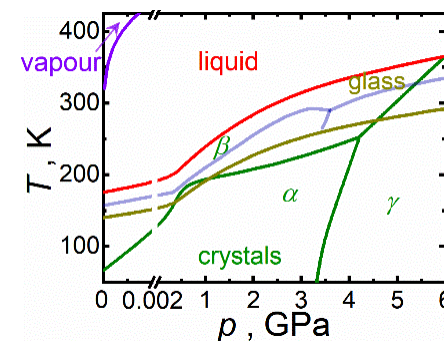
Predikce krystalových struktur



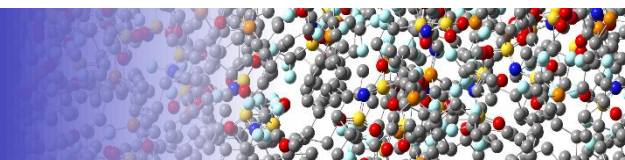
Identifikace relevantních kandidátů



Predikce materiálových vlastností a stability



Význam a aplikace: farmaceutický a optoelektronický výzkum, skladování energie



Screeningové aplikace

In silico screening = mistrovství světa molekul pro danou aplikaci

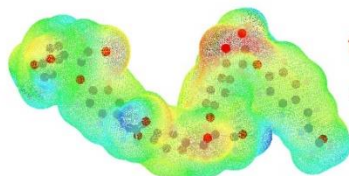
High-throughput = automatizované postupy zkoumající velké množství látek



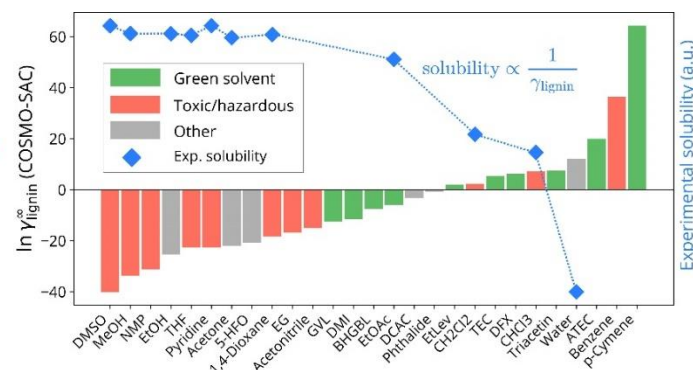
Hledání účinných a “zelených” rozpouštědel pro biopolymery pomocí modelu COSMO-SAC



kvantová
mechanika



termodynamika



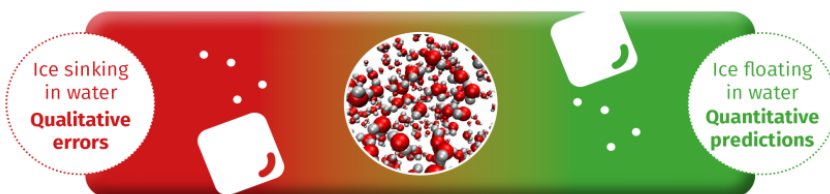
Význam a aplikace: upcycling biomasy, rozpustnost léčiv, recyklace plastů

Vývoj nových a vylepšování existujících metod

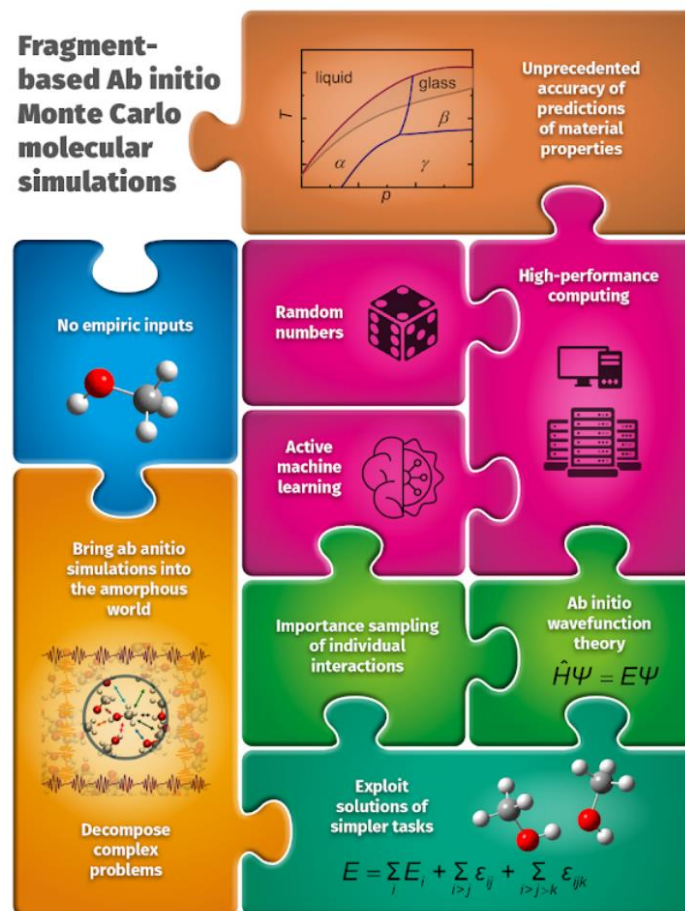
Minimalizovat množství vstupní empirické informace a výpočetní náročnost

Maximalizovat přesnost výpočtu a jeho aplikovatelnost

→ Výpočetně „levnější“ a přesnější predikce



	Past	Present	Future	FrAMonC
Simulations	Classical	DFT	Ab initio	✓
Empiric parameters	Hundreds	Dozens	Units	✓
Accuracy	Qualitative 10 kJ/mol	Chemical 4 kJ/mol	Sub-chemical <1 kJ/mol	✓
First-principles applicability	Molecules	Crystals	Liquids	✓



Témata bakalářských prací



***In silico* modelování vodivosti polymorfních organických polovodičů**



***In silico* predikce krystalových struktur farmaceuticky aktivních substancí**



Screening potenciálu pro tvorbu molekulárních kokystalů farmaceuticky aktivních substancí



Molekulární simulace těkavosti molekulárních materiálů

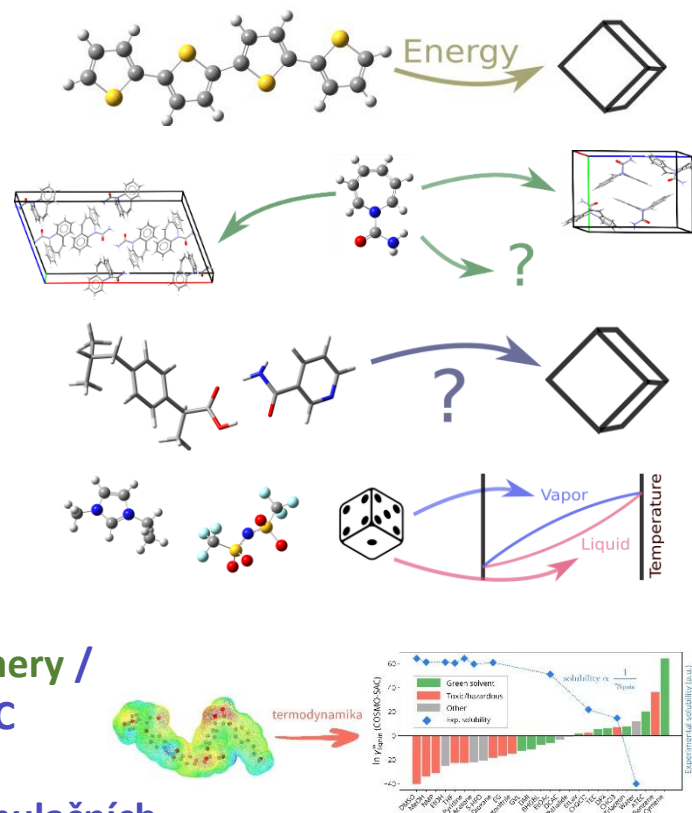


Screening optimálních rozpouštědel pro biopolymery / organické polovodiče pomocí modelu COSMO-SAC



***In silico* screening optimálních solvatačních a formulačních médií pomocí QM**

& Vývoj souvisejících výpočetních nástrojů



Naše aktivity a Vaše příležitosti

Vazba na prestižní grantové projekty

Nahlédnutí do světa moderního základního výzkumu

Štědré finanční ohodnocení motivovaných studentů

Zapojení do mezinárodní komunity výpočetních chemiků

Kontakty na světové odborníky

Možnost výměnných pobytů a stáží

Spolupráce s průmyslovými partnery

Od molekul v počítači ke konkrétním výzvám

Aktivní práce se špičkovou výpočetní technikou

Získ zkušeností s obsluhou HW a tvorbou vlastního SW

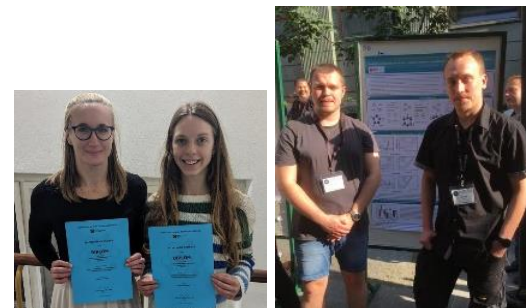
Kritický pohled na chování světa na molekulární úrovni

Třídění informací a hledání souvislostí, překonání svých limitů

Prezentace sebe sama a svých výsledků

Účast na (studentských) konferencích

Prezentace a interakce s vrstevníky, laiky i odborníky



Laboratoř výpočetní termodynamiky

Doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

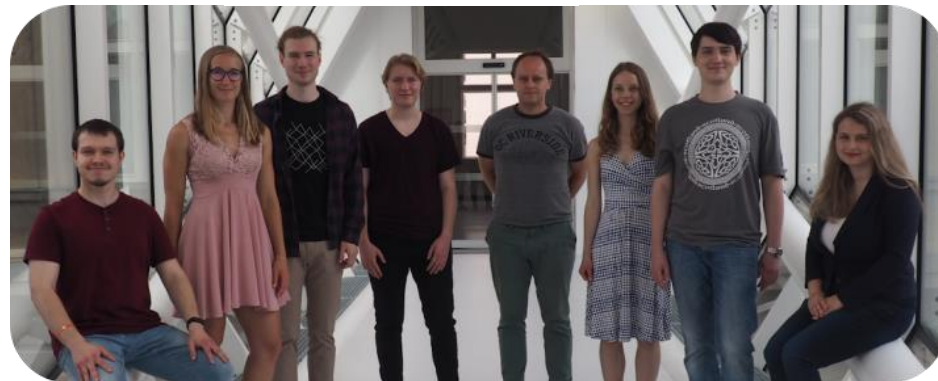
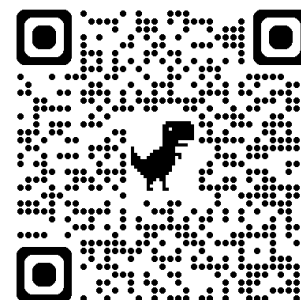
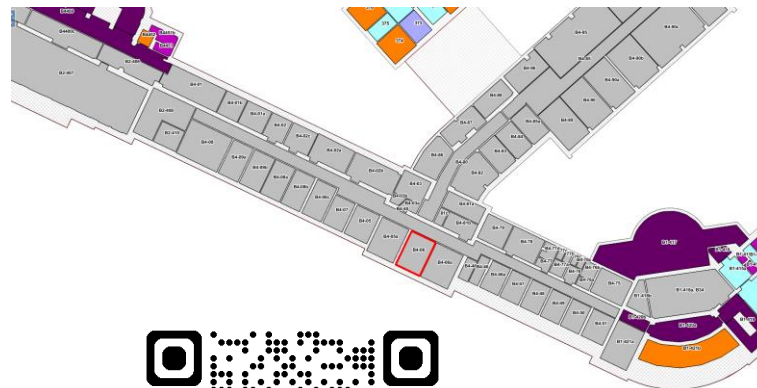
Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

ctirad.cervinka@vscht.cz

martin.klajmon@vscht.cz

Místnost B4312 (pod střechou, vchod ze Zikovy ulice)

sites.google.com/view/cervinkagroup



[@cervinkagroup.bsky.social](https://bsky.social/@cervinkagroup)