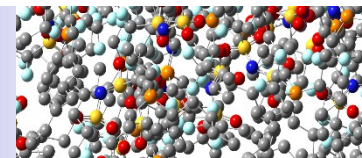
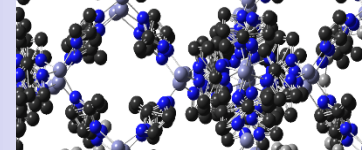


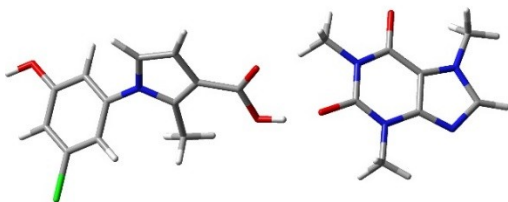
Doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Ing. Martin Klajmon, Ph.D.





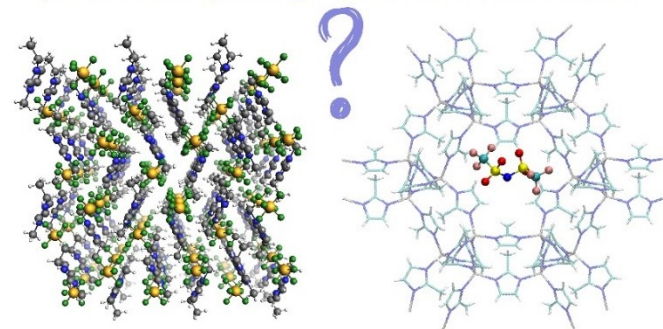
vlastnosti a interakce
jednotlivých molekul



různé výpočetní
techniky a modely



(makroskopické) vlastnosti **materiálů**



Aplikačně zajímavé látky

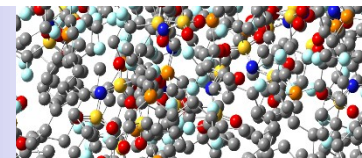
Organické polovodiče
Aktivní farmaceutické látky
(Bio)polymery
Zelená rozpouštědla

Metody výpočetní chemie

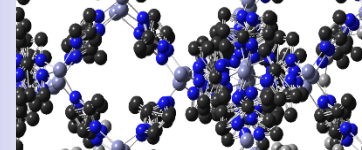
Kvantová mechanika
Molekulární simulace
COSMO
Strojové učení

Materiálový výzkum a design procesů

Teplota a entalpie tání
Těkavost
Fázové diagramy a stabilita
Rozpustnost a afinita



In silico modely molekulárních krystalů

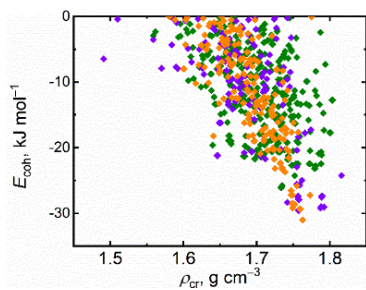
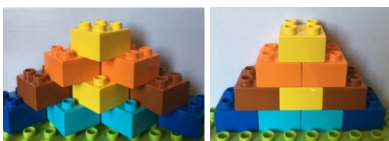


In Silico = používáme metody výpočetní chemie

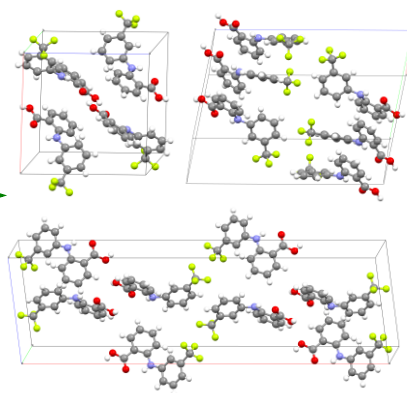
Polymorfismus = existence různých krystalových struktur pro danou látku



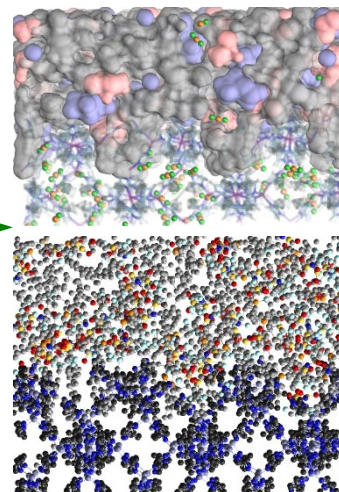
Predikce krystalových struktur



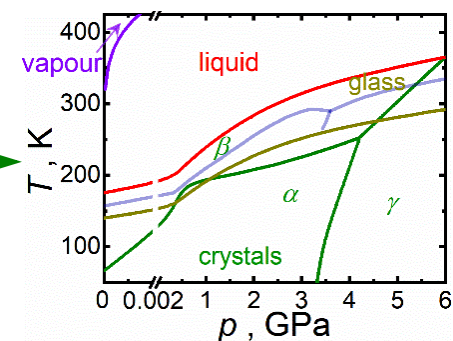
Identifikace relevantních kandidátů



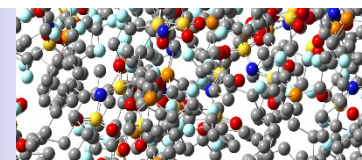
Atomistický model

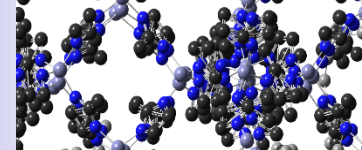


Predikce materiálových vlastností



Význam a aplikace: farmaceutický a optoelektronický výzkum, skladování energie





***In silico* screening** = mistrovství světa molekul pro danou aplikaci

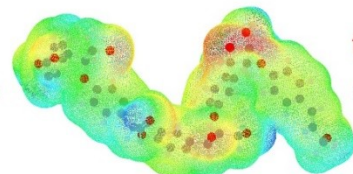
High-throughput = automatizované postupy zkoumající velké množství látek



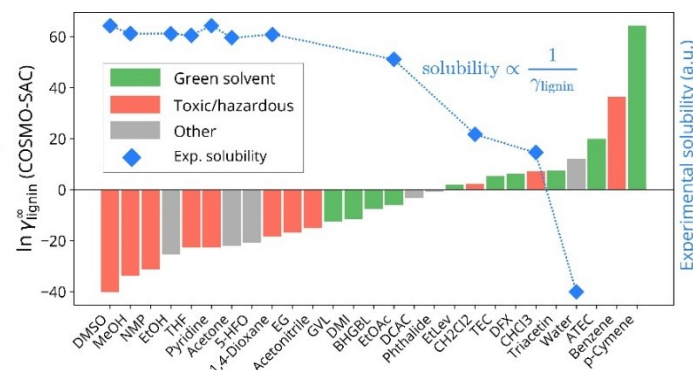
Hledání účinných a “zelených” rozpouštědel pro biopolymery pomocí modelu COSMO-SAC



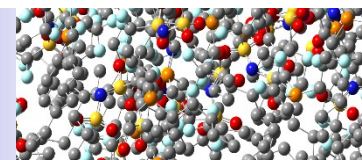
kvantová
mechanika

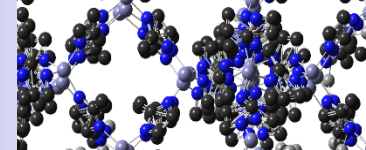


termodynamika



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



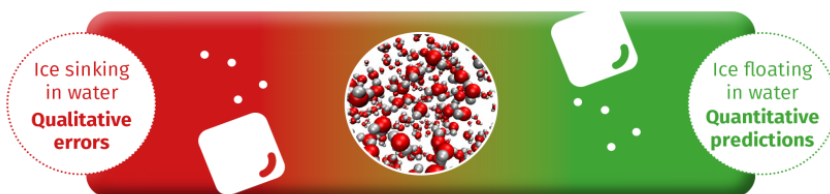


Vývoj nových a vylepšování existujících metod

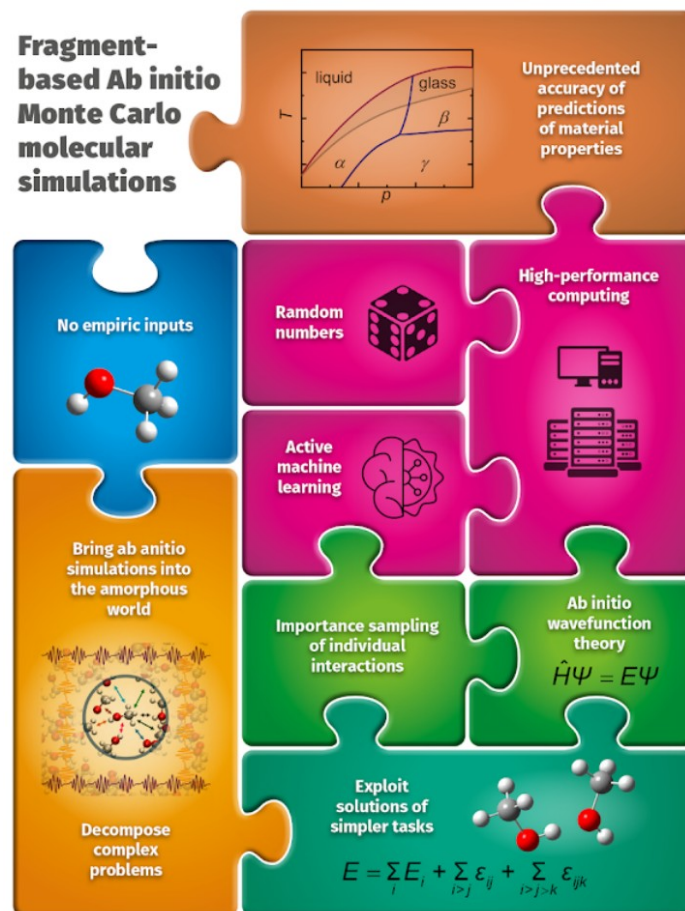
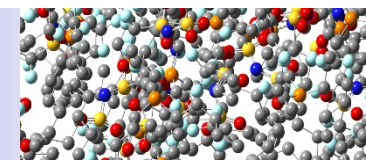
Minimalizovat množství vstupní empirické informace a výpočetní náročnost

Maximalizovat přesnost výpočtu a jeho aplikovatelnost

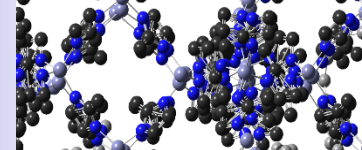
→ Výpočetně „levnější“ a přesnější predikce



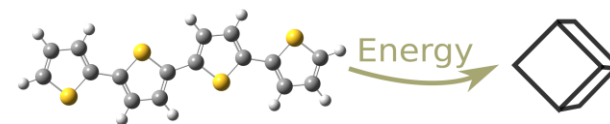
	Past	Present	Future	FrAMonC
Simulations	Classical	DFT	Ab initio	✓
Empiric parameters	Hundreds	Dozens	Units	✓
Accuracy	Qualitative 10 kJ/mol	Chemical 4 kJ/mol	Sub-chemical <1 kJ/mol	✓
First-principles applicability	Molecules	Crystals	Liquids	✓



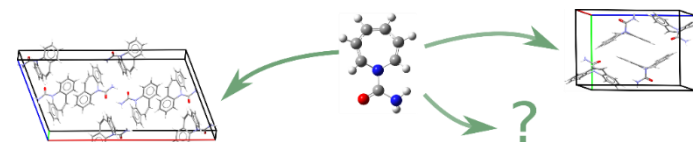
Témata bakalářských prací



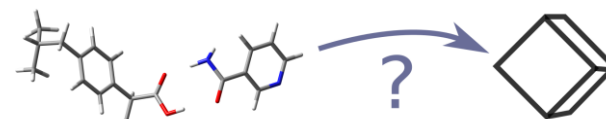
***In silico* modelování vodivosti a elektronové struktury organických polovodičů**



Atomistické simulace disolučních bariér polymorfních krystalů farmaceuticky aktivních substancí



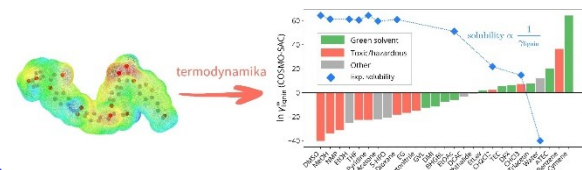
***In silico* screening potenciálu pro tvorbu molekulárních kokrystalů farmaceuticky aktivních substancí**



Molekulární simulace těkavosti molekulárních materiálů

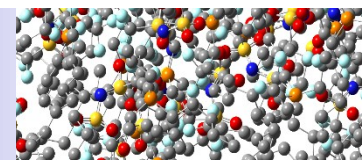


Screening optimálních rozpouštědel pro biopolymery / organické polovodiče pomocí modelu COSMO-SAC

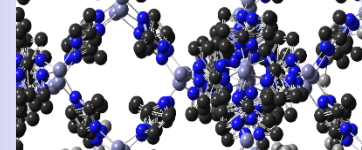


***In silico* screening optimálních solvatačních a formulačních médií pomocí kombinace QM a ML metod**

& 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 aplikačním výzvám



Aktivní práce se špičkovou výpočetní technikou

Získ zkušeností s obsluhou HW a tvorbou vlastního SW



Kritický pohled na chování světa na molekulární úrovni

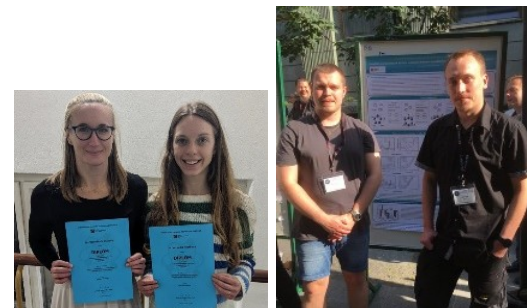
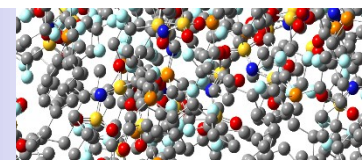
Třídění informací a hledání souvislostí, překonání svých limitů

Využívání a ověřování výstupů AI

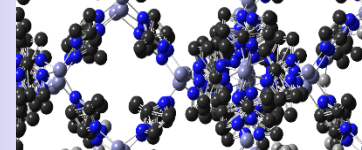
Prezentace sebe sama a svých výsledků

Účast na (studentských) konferencích

Prezentace a interakce s vrstevníky, laiky i odborníky



Laboratoř výpočetní termodynamiky



Doc. Ing. Ctírad Červinka, Ph.D.

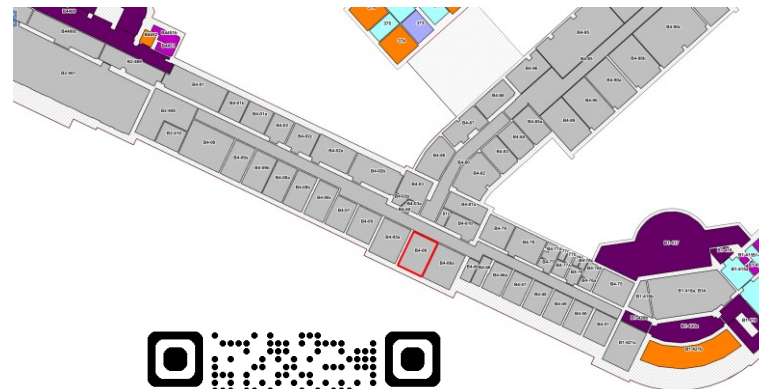
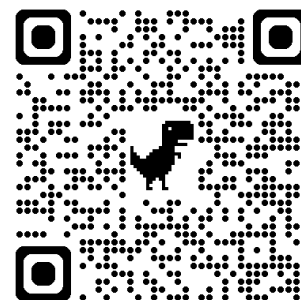
Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

ctirad.cervinka@vscht.cz

martin.klajmon@vscht.cz

Místnost B4312 (pod střechou, vchod ze Zikovy ulice)

sites.google.com/view/cervinkagroup



@cervinkagroup

