

V stredu 2. apríla 2014 sa na GJH konala 51. absolventská prednáška



Marcela Hrdá

ÚSTAV ANORGANICKEJ CHÉMIE, SLOVENSKÁ AKADEMIA VIED

„Počítanie vlastností molekúl“

Z pozvánky:

Pred pár desiatkami rokov trval numerický výpočet základného kvantového stavu vodnej molekuly niekoľko dní v univerzitnom centre. Dnes taký istý výpočet zvládne každý osobný počítač za menej ako sekundu. Vďaka rozmachu výpočtovej techniky máme dnes úžasné možnosti, vieme riešiť mnoho ťažkých problémov. Vieme vypočítať a predpovedať vlastnosti molekúl. Stále však existuje obrovský priestor na zlepšenia. Existuje veľa zaujímavých systémov (napr. veľké biomolekuly), ktorých výpočty trvajú týždne v dnešných počítačových centrách. Niekedy zasa potreba vyššej presnosti núti siahnuť po algoritme, ktorý trvá dlho aj pre sústavu zopár atómov. Numerická kvantová chémia sa v posledných rokoch prudko rozvíja, stále vznikajú nové metódy, sľubujúce väčšiu rýchlosť či presnosť. Nahliadneme, ako funguje jedna zo základných výpočtových metód a ako sa ju vedci snažia vylepšovať.