Název práce: Metodika *ab initio* a dráhově integrální molekulární dynamiky pro vodíkově vázané systémy v kondenzované fázi

Autor: Kryštof Březina

Ústav: Fyzikální ústav Univerzity Karlovy

Školitel: RNDr. Ondřej Maršálek, Ph.D., Fyzikální ústav Univerzity Karlovy

Abstrakt: Simulace *ab initio* molekulární dynamiky s atomovými jádry reprezentovanými dráhovými integrály v imaginárním čase poskytují cenný vhled do fyziky a chemie kondenzovaných vodíkově vázaných systémů na vysoké úrovni přesnosti popisu. Zároveň tyto simulace představují metodologickou a výpočetní výzvu zejména v případě, kdy jsou vyžadovány pokročilé metody teorie elektronové struktury. V této práci ukazujeme naše příspěvky ohledně začlenění potenciálů na bázi strojového učení do simulačních postupů s důrazem na použití aktivního učení pro tvorbu tréninkové sady a na efetivní generaci tréninkových geometrií samotných. S touto metodologií jsme provedli pokročilé simulace tří různých molekulárních systémů. Jako první jsme prozkoumali chování radikálaniontu benzenu rozpuštěného v kapalném amoniaku: tento systém je významný v kontextu chemie Birchovy redukce. Motivováni našimi zjištěními jsme pokračovali rozsáhlou studií π-vodíkových vazeb v roztocích benzenu v kapalné vodě a amoniaku s důrazem na strukturu, dynamiku a vibrační spektroskopii. Nakonec jsme se přesunuli do oblasti fyziky povrchů, kde jsme se věnovali modelování reakcí s přenosem protonu v dusíkatých derivátech benzochinonu v plynné fázi a na povrchu zlata a popisu klíčové role jaderných kvantových jevů pro tuto reaktivitu. Provedený výzkum je obsažen v pěti publikacích přiložených k této práci.

Klíčová slova: *ab initio* molekulární dynamika, dráhové integrály v imaginárním čase, teorie funkcionálu hustoty, potenciály na bázi strojového učení, vodíkové vazby, kondenzovaná fáze, chemická reaktivita