

Predikce vlastností a struktury molekulárních krystalů (krystalů skládajících se z molekul vázaných nekovalentními vazbami) z ab-initio výpočtů je náročný problém. Vazebné energie takovýchto struktur vyžadují použití přesných ab-initio metod, které jsou výpočetně extrémně náročné. Potenciály, které lze nafitovat na ab-initio data nebo jejichž parametry lze získat z předem vypočtené matice hustoty, lze použít k popisu interakcí vzdálených molekul, čímž lze snížit náročnost celého výpočtu. Jednou z metod zaměřených na popis elektrostatických příspěvků je distribuovaný multipólový rozvoj rozvádějí matici hustoty do sférických tenzorů kolem několika bodů na molekule. Vyvinuli jsme program, který dokáže získat koeficienty multipólového rozvoje ze dvou různých kódů integrujících matici hustoty, vypočítat elektrostatické příspěvky mezimolekulární energie a otáčet multipólový rozvoj. Toto lze provést do libovolného řádu. Dále studujeme vlastnosti vypočítaných koeficientů multipólového rozvoje v závislosti na ab-initio metodě, bázi matice hustoty a kódu, který byl použit pro integraci matice hustoty. Otestovali jsme predikci elektrostatické interakce na molekulárních krystalech s různými fyzikálně-chemickými vlastnostmi – methanol, metan, amoniak a oxid uhličitý. Dále jsme se také pokusili nafitovat koeficienty jednoho multipólového rozvoje na molekule na předpočítaných datech interakčních energiích dimerů. Abychom otestovali možnost získávání distribuovaných vlastností z existujících datasetů, vyzkoušeli jsme proložení jednoduchého modelu korelační energie pomocí klasických fitovacích postupů i technik ze strojového učení.