

Pracoviště teoretické fyzikální chemie (Oddělení teoretické chemie)

Kontakty: Mgr. Dr. rer. nat. Jiří Pittner

T.: 266052015, jiri.pittner@jh-inst.cas.cz

Mgr. Roman Čurík, PhD.

T.: 266053256, roman.curik@jh-inst.cas.cz

Výpočetní vybavení

Naši práci provádíme na systémech ("klastrech") skládajících se z několika počítačových jednotek, zpravidla nadstandartně vybavených PC. V současné době máme k dispozici například tyto klastry:

- Orion - 1 čtyřprocesorový, 4 dvouprocesorové a 1 jednoprocessorový 64-bit Opteron, 6 GB RAM, Linux. Je určen pro MRCC výpočty.

Name	Nodes	CPU	CPU freq	RAM	Scratch
javor	1	AMD Opteron 244	1800 MHz	6.0 GB	73 GB
jasan	2	AMD Opteron 250	2400 MHz	6.0 GB	208 GB
jilm	2	AMD Opteron 250	2400 MHz	6.0 GB	208 GB
habr	2	AMD Opteron 250	2400 MHz	6.0 GB	208 GB
buk	4	AMD Opteron 275	2200 MHz	8.0 GB	137 GB
dub	2	AMD Opteron 254	2800 MHz	8.0 GB	137 GB

- Antares - 3 dvou a 3 jednoprocessorové počítače a 1-2 GB RAM, Linux
- Bohr - 10 dvouprocesorových 64-bit počítačů

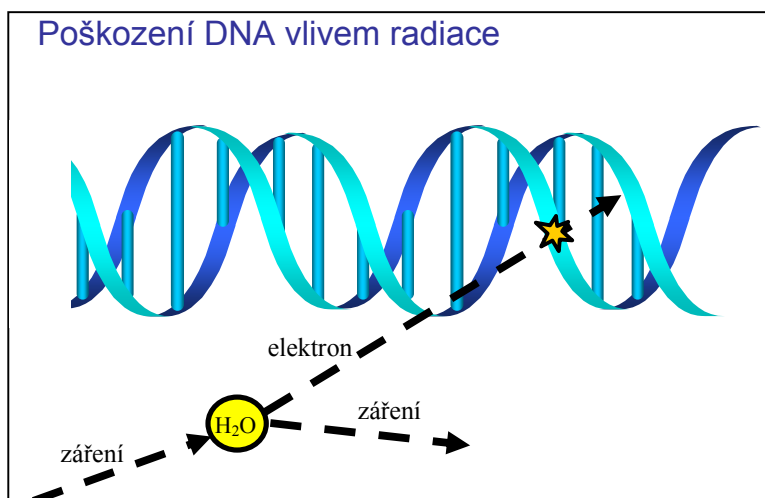
Každému procesoru přísluší jedna fronta, tzn. každá úloha se počítá jen na jednom jádře. Na fyzickém paralelismu se pracuje.

Krátký popis zaměření pracoviště

Srážky elektronů s molekulami nebo ionty hrají důležitou roli v různých oborech biologie, chemie a fyziky. Příklady pro tyto procesy mohou být nalezeny v průmyslových plasmách, planetárních atmosférách, mezihvězdných oblacích nebo i v dějích, které vedou k poškození DNA a k následním mutacím (viz obrázek 1). Elektronová spektroskopie je užitečná technika pro identifikaci chemiabsorbovaných částic, protože umožňuje pozorovat opticky zakázané přechody.

Proto jedním z vědeckých zaměření skupiny je vývoj kvantové metody pro výpočty účinných průřezů srážek elektronů a molekul. Metoda „Discrete Momentum Representation“ (DMR) vyvinutá v naší skupině je v současné době vhodná k popisu elastických srážek a také kolizí, které vedou k přenosu srážkové energie do vibračního pohybu molekuly. Efektivita tohoto přenosu podává informaci o jejím možném roztržení.

V budoucnu je naším cílem zpřesnění současného modelu spolu s jeho rozšířením pro popis přenosu energií do elektronových a rotačních excitací.



Obrázek 1. Před pěti lety bylo prokázáno, že jedním z nejdůležitějších mechanismů poškození DNA, které může vést k mutacím a rakovině, je přerušení vazeb tzv. sekundárními elektrony. Obrázek zjednodušeně naznačuje vznik sekundárních elektronů procesem ionizace okolních molekul vody nebo přímo částí DNA.