

Výpočetní chemie

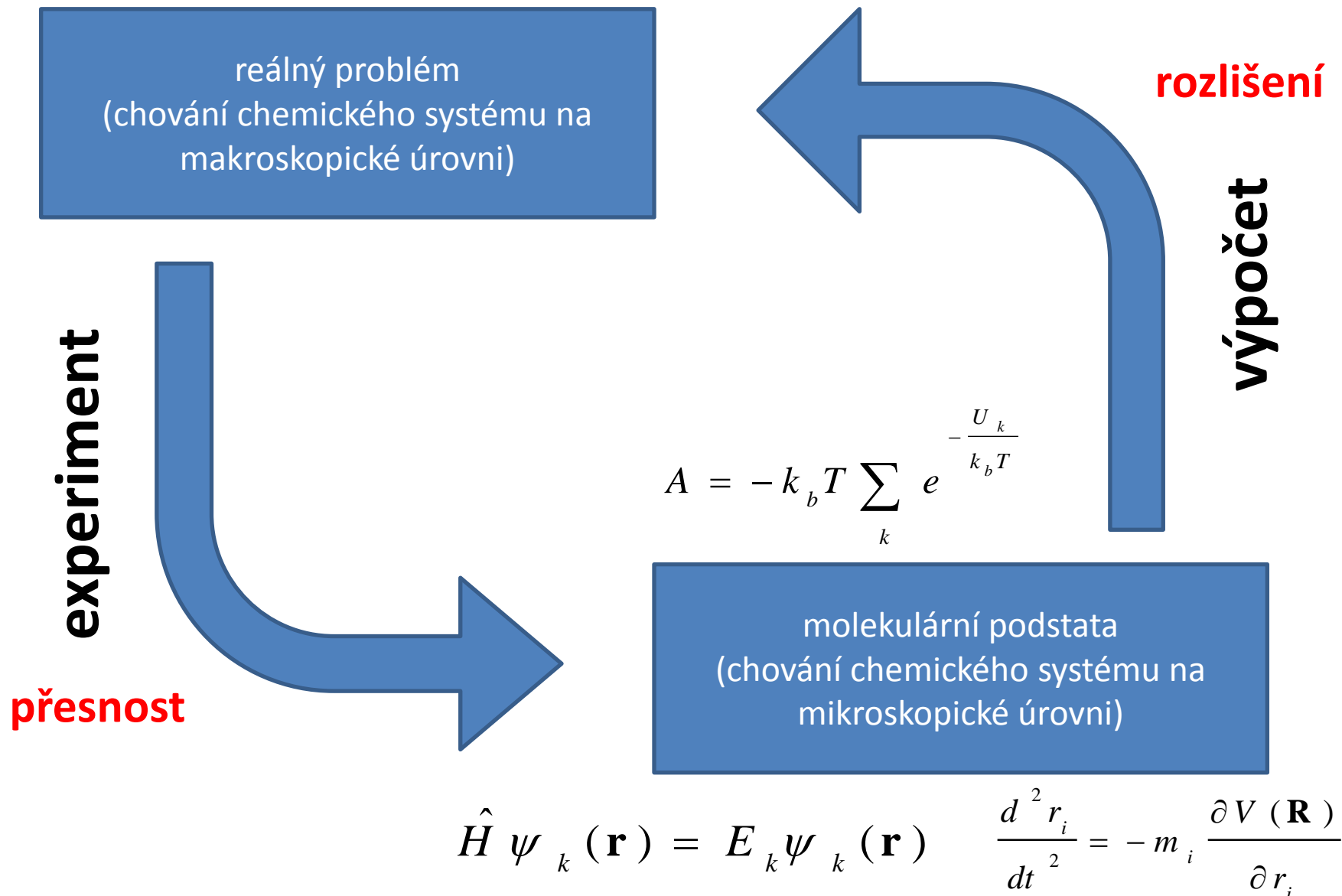
Skupina LCC

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul
&
CEITEC – Středoevropský technologický institut
Univerzitní kampus Bohunice, Pávilon A4
Masarykova Univerzita
Kamenice 5, Brno

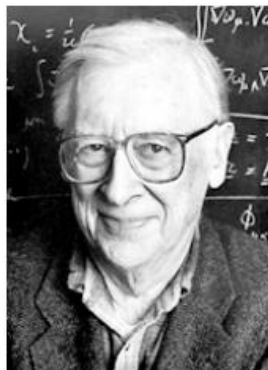
Výpočetní chemie



Nobelova cena za chemii 1998/2013



Walter Kohn



John A. Pople



© Harvard University
Martin Karplus



Photo: © S. Fisch
Michael Levitt



Photo: Wikimedia
Commons
Arieh Warshel

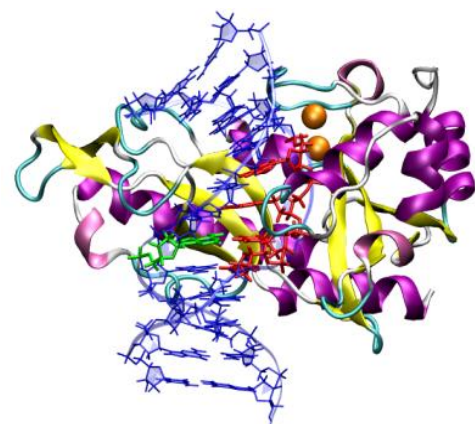
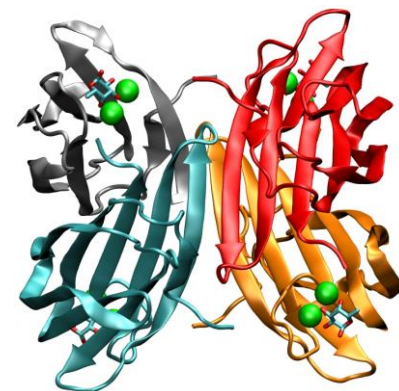
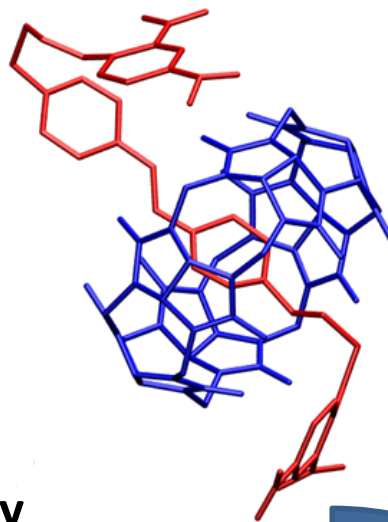
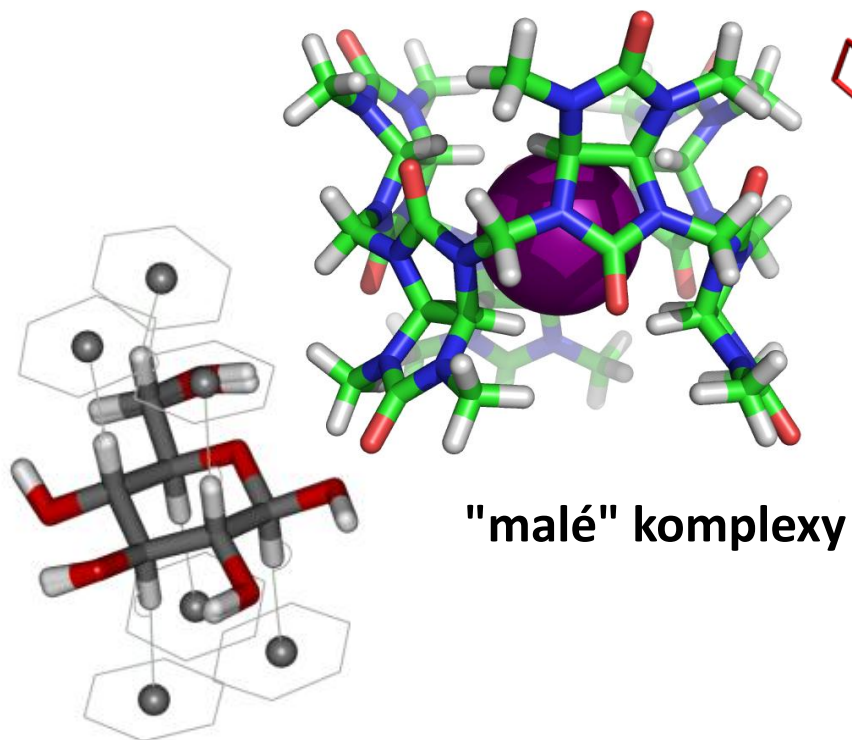
The Nobel Prize in Chemistry 1998 was divided equally between

Walter Kohn "for his development of the **density-functional theory**" and
John A. Pople "for his development of **computational methods in quantum chemistry**"

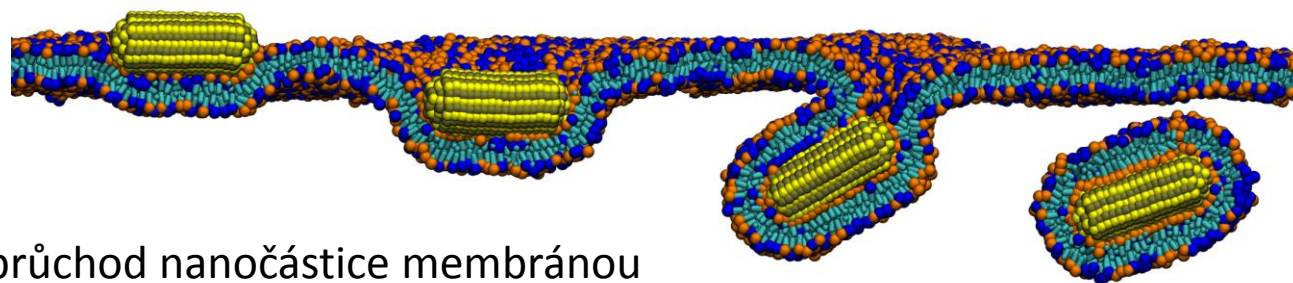
Development of Multiscale Models for Complex Chemical Systems

http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/
http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/

Co děláme ...



biomolekulární
systémy



Výpočetní zdroje



MetaCentrum/CERIT-SC

- Národní gridová infrastruktura
- ca 6000 CPU jader
- **CEITEC/NCBR vlastní zdroje cca 1000 CPU jader**
- 5 x 100 TB úložných diskových polí

<http://www.metacentrum.cz/>

<http://www.cerit-sc.cz/>

Účet může získat student libovolné vysoké školy.

<http://www.it4i.cz/>

- grantové žádosti
- cca 25 % strojového času pro LCC skupinu

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

C2115 Praktický úvod do superpočítání

Laboratoř výpočetní chemie

<http://lcc.ncbr.muni.cz>

Národní centrum pro výzkum biomolekul, UKB, Pavilon A4
Vedoucí skupiny: **prof. RNDr. Jaroslav Koča, DrSc.**

RNDr. Petr Kulhánek, Ph.D.
kulhanek@chemi.muni.cz

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

C2115 Praktický úvod do superpočítání

C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I – cvičení

- Práce na zajímavých projektech
- Využívání nejmodernějších výpočetních technologií
- Práce ve zkušeném kolektivu
- Zahraniční stáže
- Možnost práce z domu

