

# C8863 Free Energy Calculations

## Lesson 0 Organizace výuky

**JS/2022 Prezenční forma výuky: Rev2**

Petr Kulhánek

[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto:kulhanek@chemi.muni.cz)

National Centre for Biomolecular Research, Faculty of Science  
Masaryk University, Kamenice 5, CZ-62500 Brno

# Organizace výuky

# Harmonogram semestru

**Výuka:** 14. února 2022 – 20. května 2022  
**Zkouškové období:** 23. května 2022 – 1. července 2022

**Celkový počet přednášených hodin:** 14 x 2 hodiny = 28 hodin

**Zakončení:** kolokvium (2+1 kredity)

**Celková hodinová zátěž předmětu:**

1 ECTS kredit -> 26 hodin studijní zátěže; 3 kredity -> 2x 26 hodin = **78 hodin studijní zátěže**

## Prezenční forma výuky



**Prezenční výuka:**  
**28 hodin**



**Samostudium, domácí úlohy,  
příprava na zkoušku:**  
**50 hodin**

# Hodnocení znalostí

## Zakončení:

- **závěrečný test (případně ústní pohovor)**

Test 50 otázek (50 bodů); délka 1 hodina;

hodnocení F < 30 bodů;

hodnocení E = <30, 35) bodů;

hodnocení D = <35, 40) bodů;

hodnocení C = <40, 45) bodů;

hodnocení A a B  $\geq$  45 bodů plus ústní pohovor.

Hodnocení lze zlepšit o jeden stupeň ústním pohovorem.

# Doporučená literatura

- Leach, A. R. *Molecular Modelling: Principles and Applications*, 2nd ed.; Prentice Hall: Harlow, England ; New York, 2001.
- Lelièvre, T.; Stoltz, G.; Rousset, M. *Free Energy Computations: A Mathematical Perspective*; Imperial College Press: London ; Hackensack, N.J, 2010.
- Chipot, C.; Pohorille, A. *Free Energy Calculations Theory and Applications in Chemistry and Biology*; Springer: Berlin, 2007.