

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Úvod

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Obsah - přednáška

➤ Výpočetní chemie

definice, výpočetní chemie versus experiment, přehled řešených projektů, experimentální metody s atomárním a jednomolekulárním rozlišením

➤ Kvantová mechanika I

stručný úvod, Bornova-Oppenheimerova aproximace, koncept hyperploch potenciální energie, stručný přehled metod pro výpočet potenciální energie

➤ Struktura

struktura, vizualizace, formáty, typy souřadnic (interní, kartézské)

➤ Plochy potenciální energie I

definice, stacionární body, jejich charakterizace a význam, optimalizační metody, lokální a globální minima

➤ Kvantová mechanika II

volná částice, tuhý rotátor, harmonický oscilátor, atom vodíku, variační a poruchové metody, Hartree-Fockova metoda, semiempirické metody

➤ Plochy potenciální energie II

reakční cesty a konformační přeměny, reakční koordináta, hledání tranzitních stavů, vztah potenciální energie k termodynamickým veličinám, primární a sekundární izotopový efekt

➤ Molekulová mechanika I

silová pole, vazebné a nevazebné interakce, dalekodosahové interakce, bodové náboje, přehled silových polí

➤ Molekulová dynamika

vývoj systému v čase, pohybové rovnice, přehled integračních metod, vlastnosti systému, termostaty, barostaty

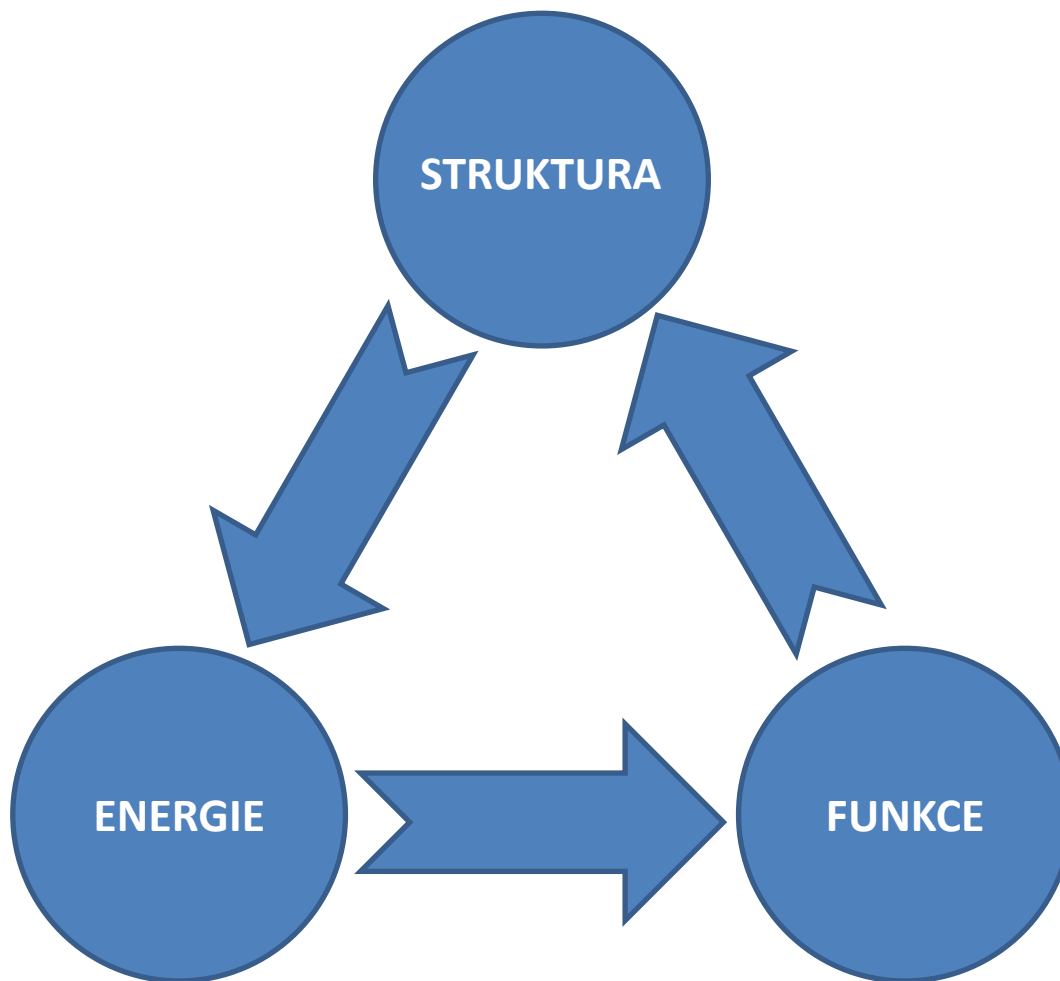
➤ Kvantová mechanika III

post-HF metody (MPx, CC), CBS, DFT metody, korekce disperzních interakcí, BSSE

➤ Molekulová mechanika II

dalekodosahové interakce, modelování rozpouštědel, polarizovatelná silová pole

Hlavní směrování přednášky



Obsah - cvičení

- **Stručný úvod do Linuxu**
- **Praktické procvičování probírané látky**
- **I. samostatný projekt (modelování reakce)**
mechanismus jednoduché reakce za použití semiempirické kvantově chemické metody

Program Gaussian: www.gaussian.com

- **II. samostatný projekt (molekulová dynamika)**
studium konformačního chování malé organické molekuly

Program AMBER: www.ambermd.org

Harmonogram semestru

Období pro zápis předmětů:

	2. září	2013	-	29. září	2013
Výuka:	16. září	2013	-	20. prosince	2013
Období prázdnin:	21. prosince	2013	-	1. ledna	2014
Zkouškové období:	2. ledna	2013	-	14. února	2014

C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I

Zakončení: kolokvium (2+1 kredity), zkouška (2+2 kredity)

Celkový počet odpřednášených hodin: 14 x 2 hodiny = 28 hodin

Celková hodinová zátěž předmětu:

1 ECTS kredit -> 26 hodin studijní zátěže

4 kredity -> 4x 26 hodin = **104 hodin studijní zátěže**

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I – cvičení

Zakončení: zápočet (1+1 kredity)

Celkový počet odpřednášených hodin: 14 x 2 hodiny = 28 hodin

Celková hodinová zátěž předmětu:

1 ECTS kredit -> 26 hodin studijní zátěže

2 kredity -> 2x 26 hodin = **52 hodin studijní zátěže**

Hodnocení znalostí

Zakončení:

- dva protokoly ze samostatných projektů (cvičení)
- 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 (a neomezeně zhoršit) ústním pohovorem.

Související/Navazující předměty

Přednášky zaměřené na teorii

C9920 Úvod do kvantové chemie a elektronové struktury molekul

C9930 Metody kvantové chemie

C9550 Kvantová chemie a molekulová spektroskopie

C9545 Chemical Bond Theory

C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II

C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení

C8863 Výpočty volných energií

C8862 Výpočty volných energií – cvičení

C9925 Introduction to soft matter models of membranes and proteins

Přednášky zaměřené na počítání

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

C2115 Praktický úvod do superpočítání