

Výpočetní chemie

Skupina LCC

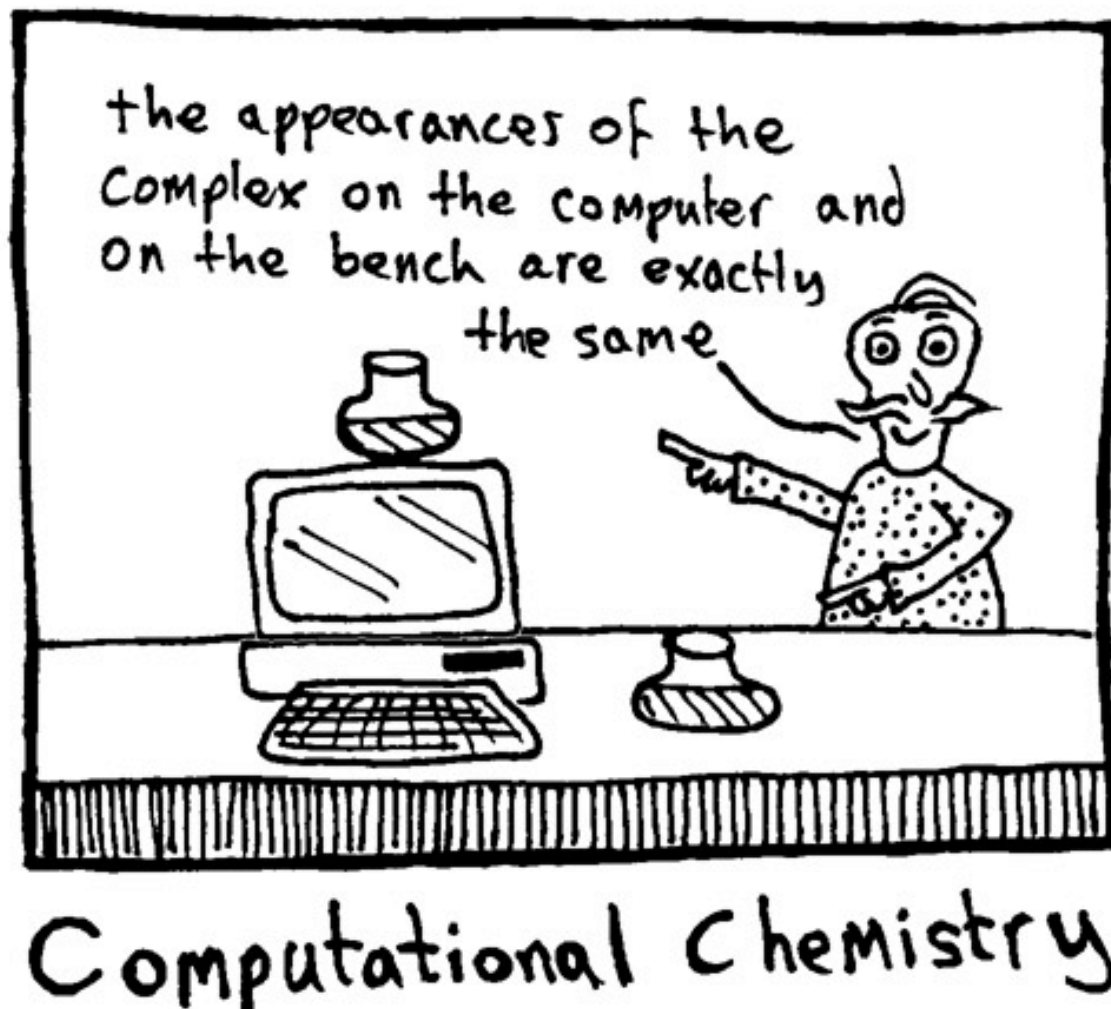
Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul
&

CEITEC – Středoevropský technologický institut
Univerzitní kampus Bohunice, Pavilon A4
Masarykova Univerzita
Kamenice 5, Brno

Výpočetní chemie

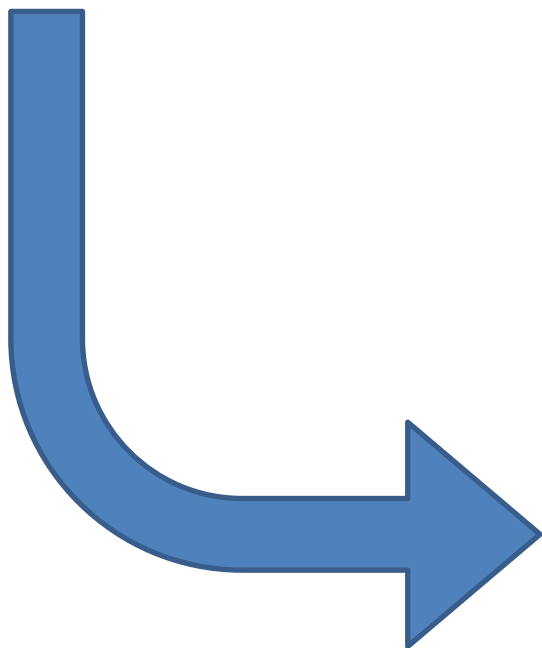


<http://www.ninger.com/images/comp.jpg>

Výpočetní chemie

reálný problém
(chování chemického systému na
makroskopické úrovni)

experiment



molekulární podstata
(chování chemického systému na
mikroskopické úrovni)

Výpočetní chemie

reálný problém
(chování chemického systému na
makroskopické úrovni)

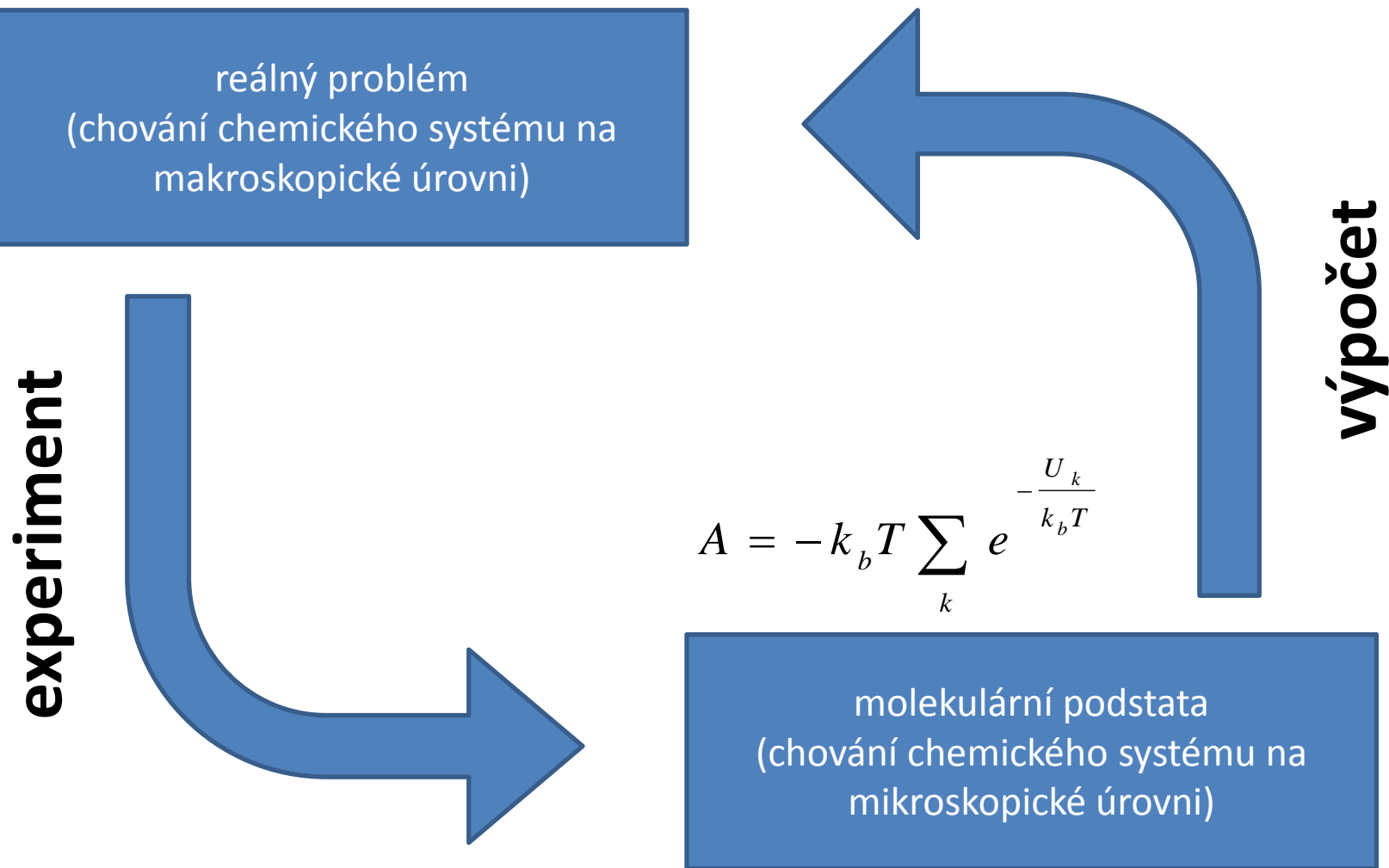
experiment

$$A = -k_b T \sum_k e^{-\frac{U_k}{k_b T}} \quad \text{a další}$$

molekulární podstata
(chování chemického systému na
mikroskopické úrovni)

$$\hat{H} \psi_k(\mathbf{r}) = E_k \psi_k(\mathbf{r}) \quad \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -m_i \frac{\partial V(\mathbf{R})}{\partial r_i}$$

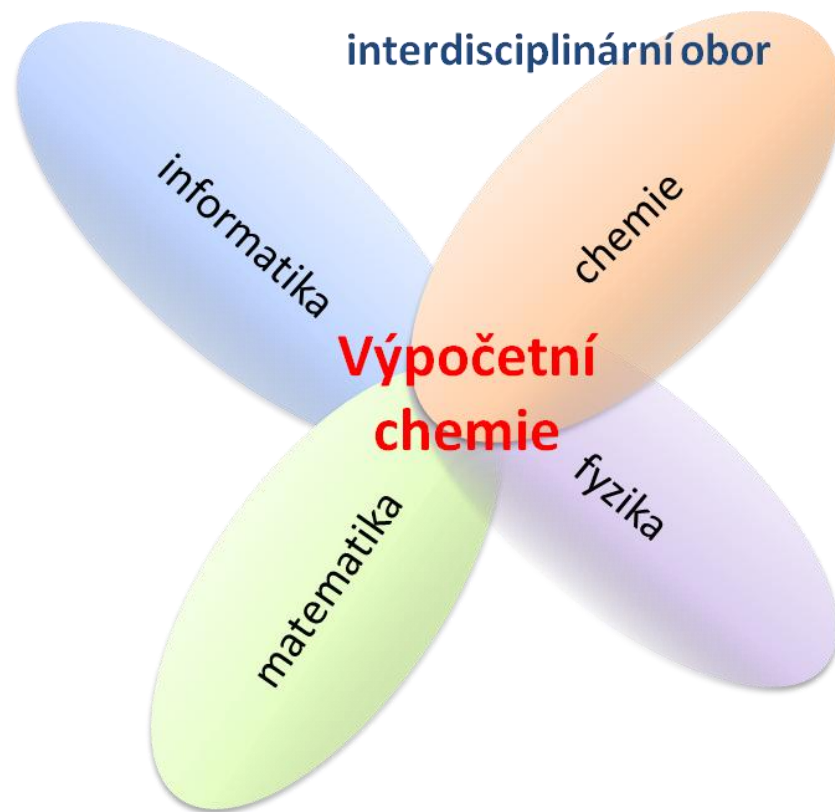
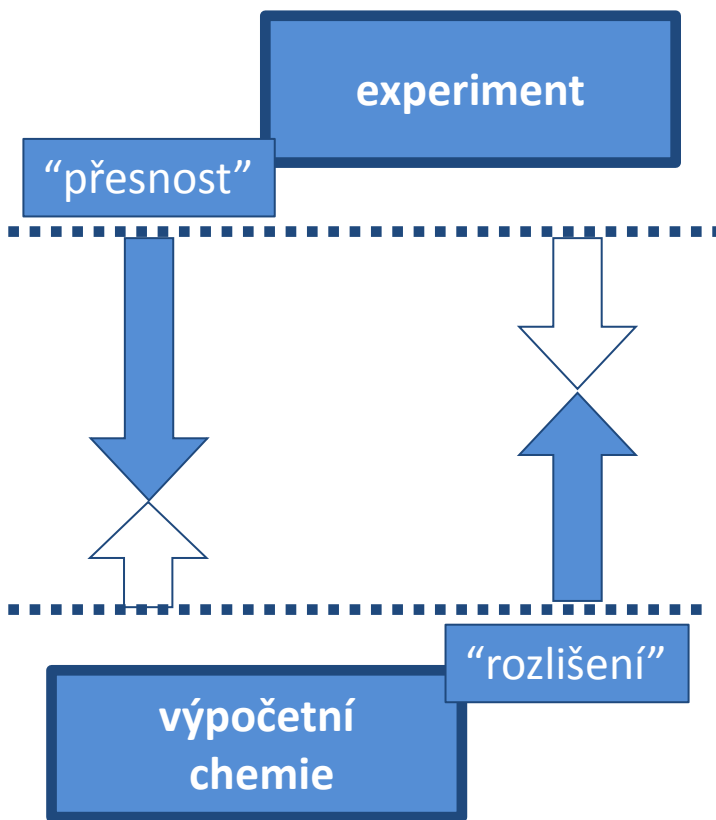
Výpočetní chemie



$$\hat{H} \psi_k(\mathbf{r}) = E_k \psi_k(\mathbf{r}) \quad \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -m_i \frac{\partial V(\mathbf{R})}{\partial r_i}$$

Výpočetní chemie

Výpočetní chemie (Computational Chemistry, počítačová chemie)

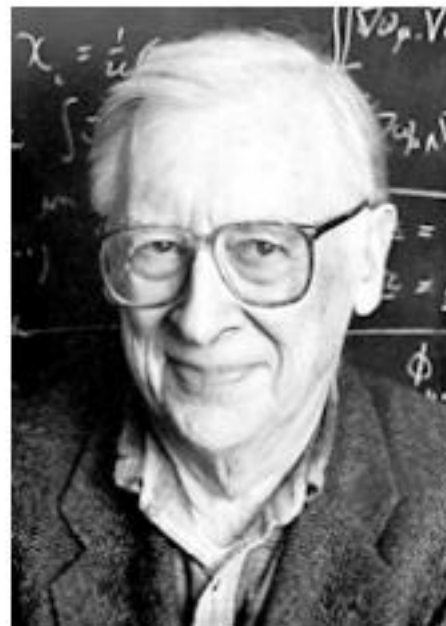


Výpočetní chemie může doplnit **experimentální výsledky** pomocí **počítačových simulací** studovaných systémů s **atomovým rozlišením** a získat tak **ucelený a konzistentní pohled** na studovaný problém.

Nobelova cena za chemii 1998



Walter Kohn



John A. Pople

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**"

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

Nobelova cena za chemii 2013



© Harvard University
Martin Karplus



Photo: © S. Fisch
Michael Levitt



Photo: Wikimedia
Commons
Arieh Warshel

Development of Multiscale Models for Complex Chemical Systems

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

Kdo jsme ...



prof. RNDr. Jaroslav Koča, DrSc.

- 1 profesor
- 5 výzkumných asistentů
- 3 post-doc studenti
- 14 doktorských studentů
- 20 bakalářských a magisterských studentů



RNDr. Petr Kulhánek, Ph.D.

E-mail: petr.kulhanek@ceitec.muni.cz
Expertise: QM, QM/MM, MD, Free Energy



Mgr. Martin Prokop, Ph.D.

E-mail: martin.prokop@ceitec.muni.cz
Expertise: Software dev, Docking



RNDr. Radka Svobodová, Ph.D.

E-mail: radka.svobodova@ceitec.muni.cz
Expertise: Chemo and Bioinformatics



RNDr. Robert Vácha, Ph.D.

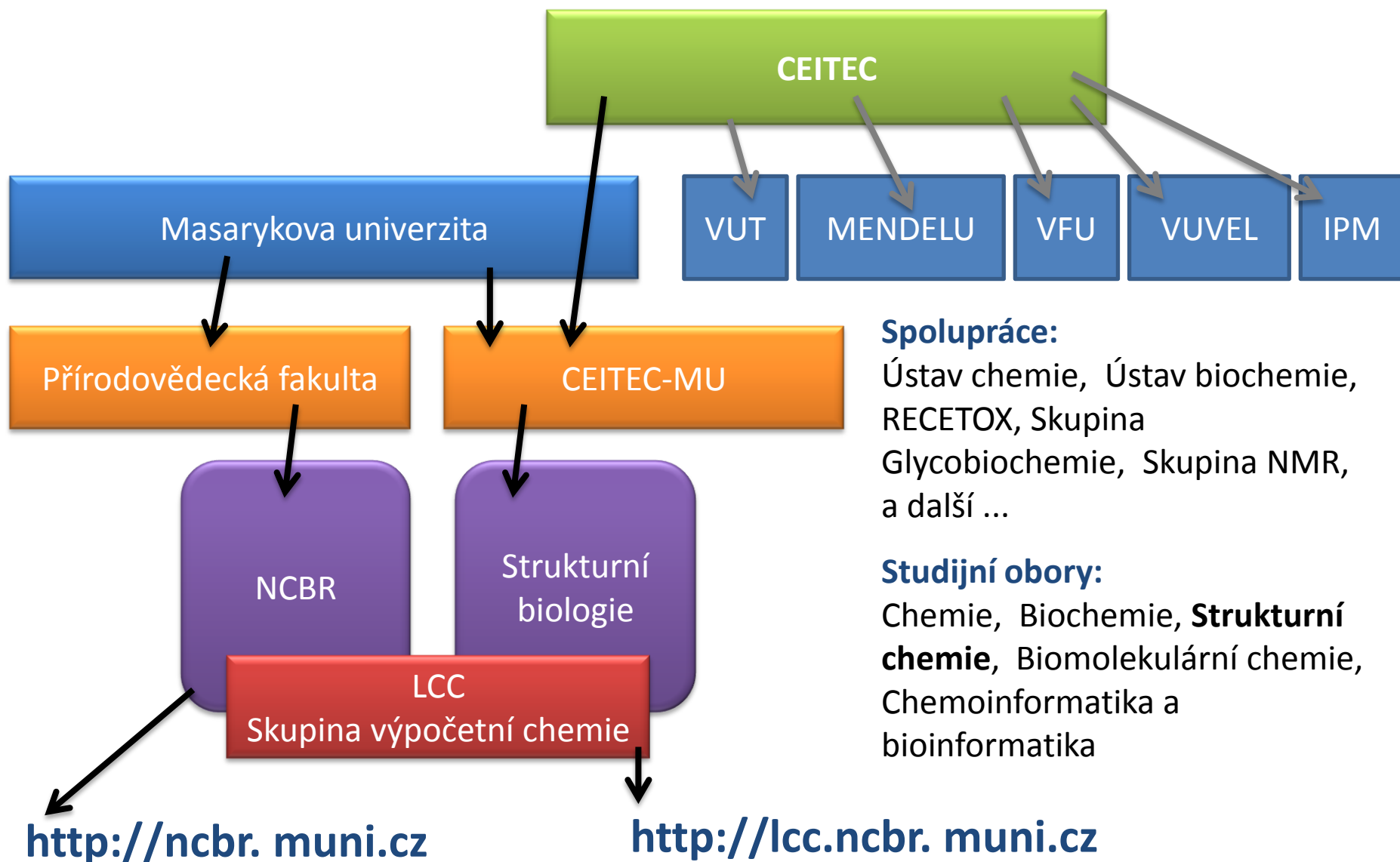
E-mail: robert.vacha@ceitec.muni.cz
Expertise: MD, MC, Coarse Grain, Free Energy



Mgr. Stanislav Kozmon, Ph.D.

E-mail: stano@chemi.muni.cz
Expertise: QM, QM/MM

Kam patříme ...



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/>

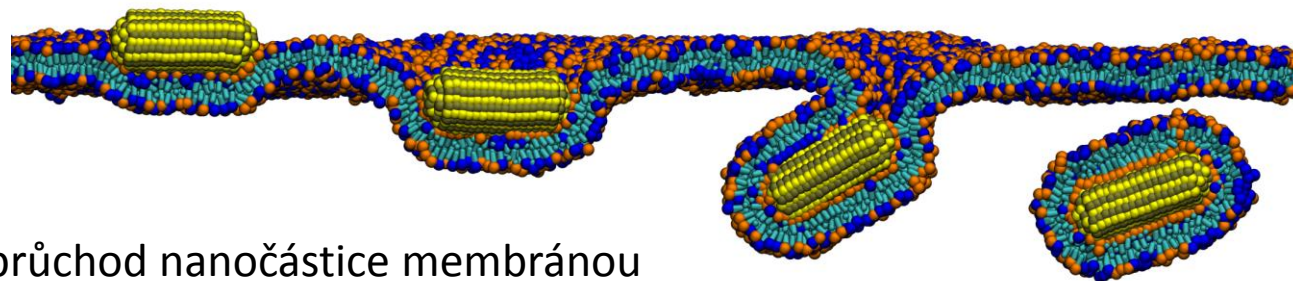
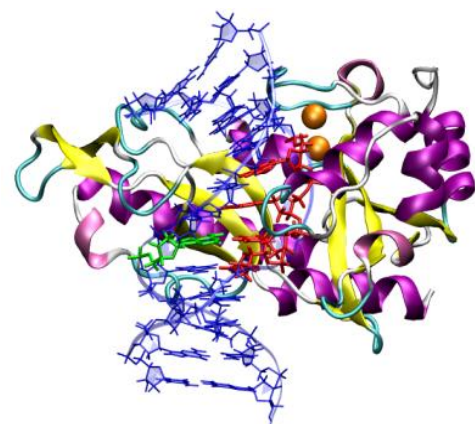
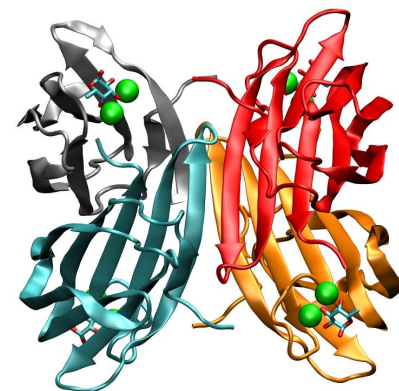
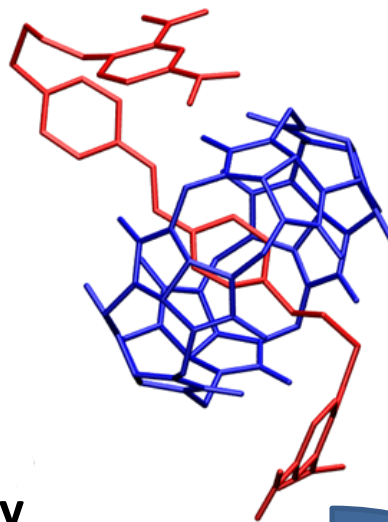
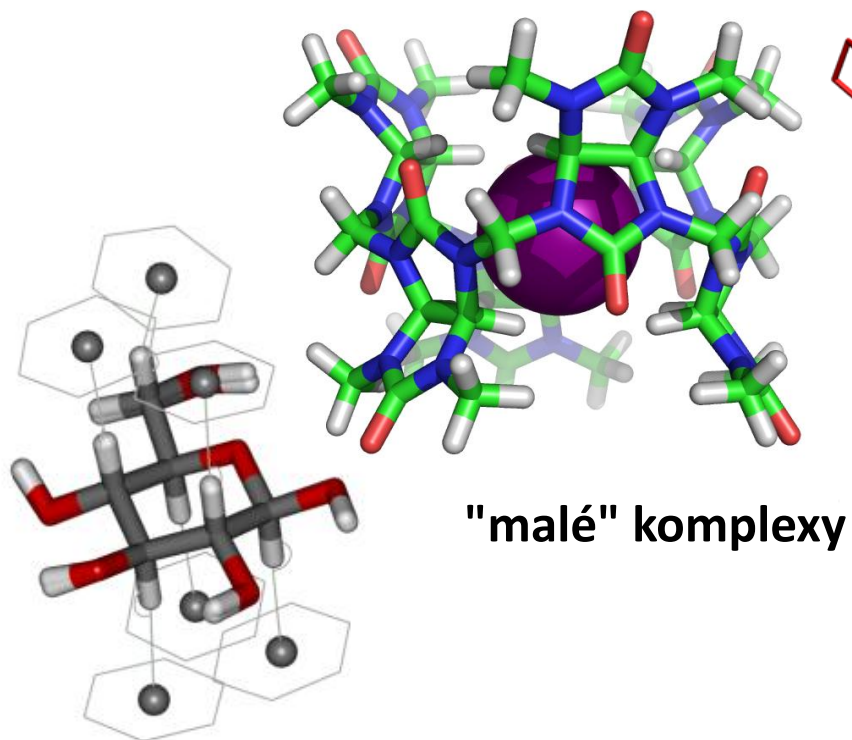
<http://www.cerit-sc.cz/>

Účet může získat student libovolné vysoké školy.

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

C2115 Praktický úvod do superpočítání

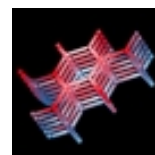
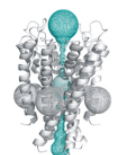
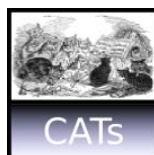
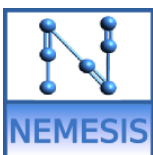
Co děláme ...



průchod nanočástice membránou

biomolekulární
systémy

Vyvíjený software

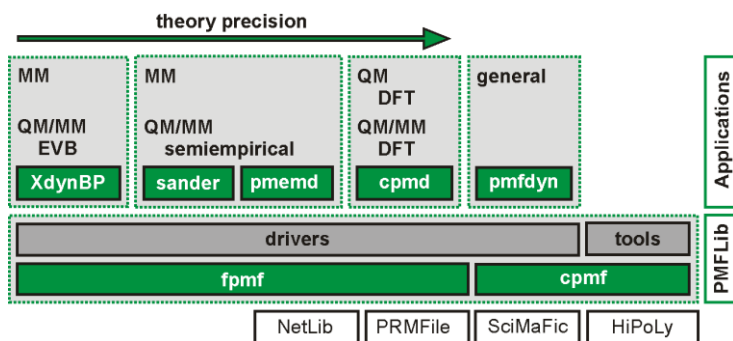


Triton

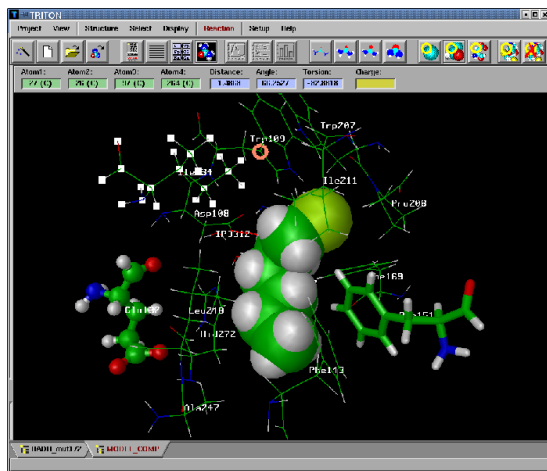
Mole

SiteBinder

EEM



TRITON



NEMESIS

Residue Editor

Graphics Manager

Project: test1

Graphics objects

Name	L	B	S	F	R
Light 1					
Background 1					
Standard Model 1					
Freezed Atoms 1					
Fast Model 1					
Fast Model 2					
Fast Model 3					

Active profile: Profile 1

Profile: Profile 1

Profile objects

Name	L	B	S	F	R
Fast Model 2					
Fast Model 3					
Standard Model 2					
Standard Model 3					
PBCBox 1					
Plane 1					
Fast Model 4					

Residue Editor

Basic Show Nice res

Residue: DG

Local index

By order	By reverse order	Aggregate hydrogens	Aggregate terminals
232	1	P	P
233	2	O1P	O2
234	3	O2P	O
235	4	O5'	OS
236	5	C5'	C

Editor Atoms

Serindx	Locindx	Name	Symbol	Type	X [Å]	Y [Å]	Z [Å]	Ch
232	1	P	P	P	44.435	16.285	30.110	
233	2	O1P	O	O2	45.693	16.741	29.607	
234	3	O2P	O	O2	43.638	15.272	29.407	
235	4	O5'	O	OS	44.770	15.625	31.489	
236	5	C5'	C	Cl	45.445	16.396	32.453	

Build panel

Basic General

Delete atom Make bond

Break bond Delete bond

Optimize

Geometry

Position Distance Angle Torsion

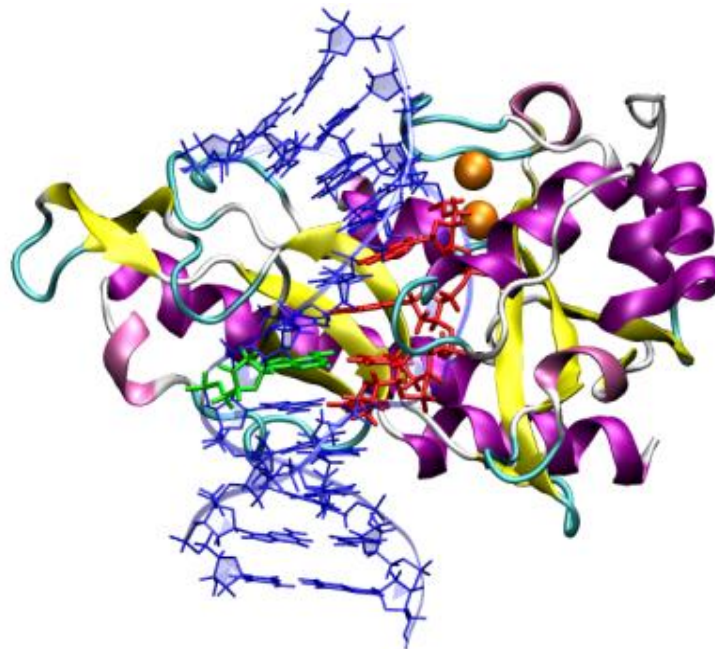
SubID	Name	Type	ID	Des
0	Na+	Atom	8599	
0	Na+	Atom	8600	

Value: 3.305 Å

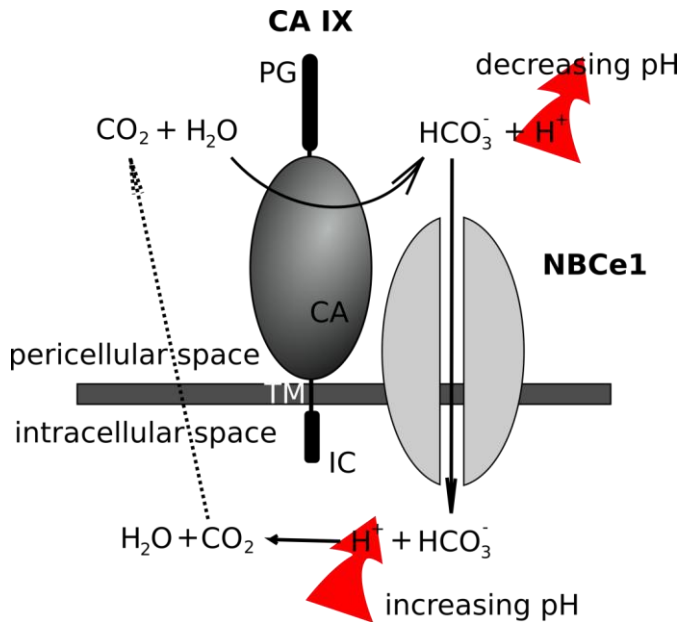
Více na: <https://lcc.ncbr.muni.cz>

Vybrané projekty

Studium (bio)molekulárních systémů



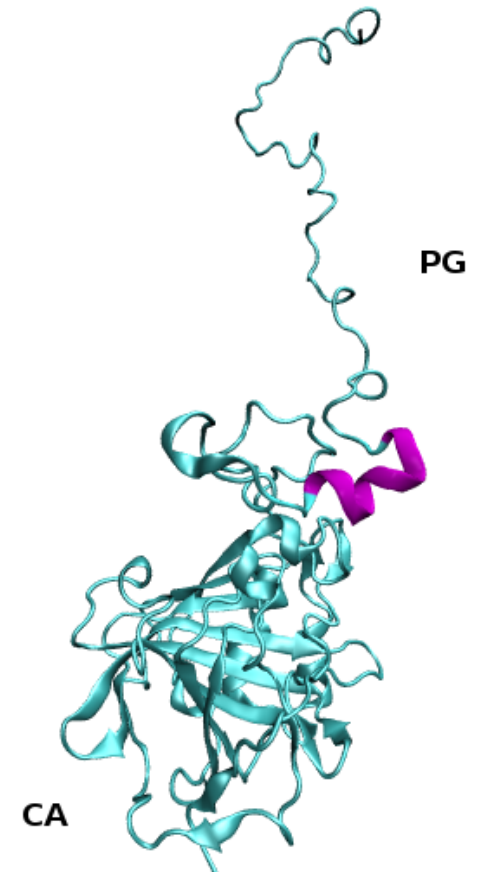
Karbonická anhydráza IX



a)



b)

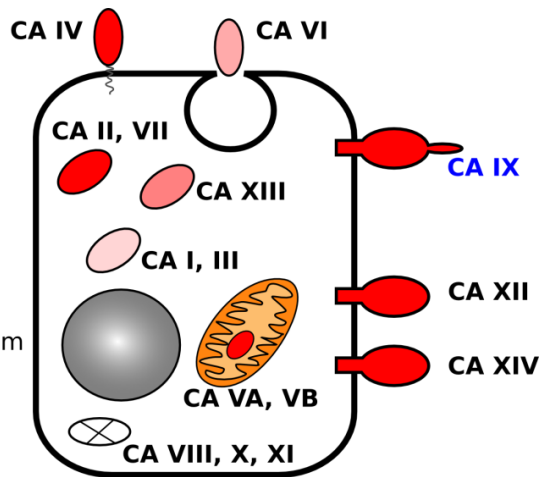


Zvýšená produkce CA IX v solidních nádorech, snížené pH zvyšuje mobilitu nádorových buněk.

Spolupráce: Slovenská akademie věd

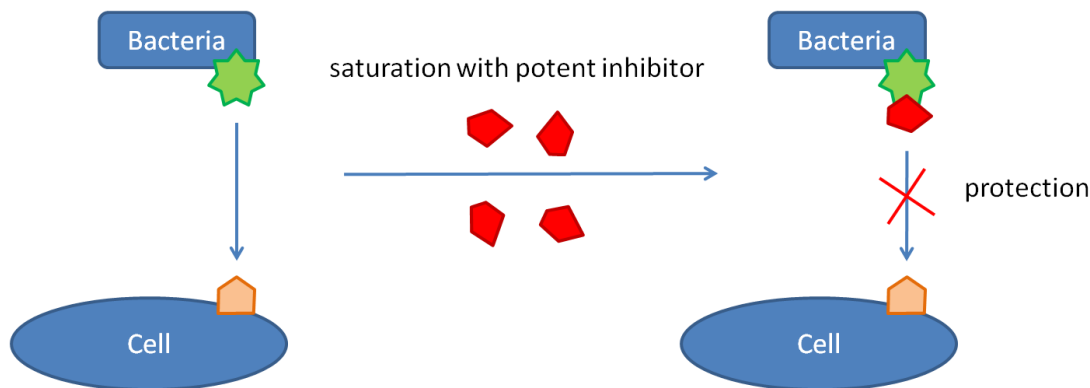
a) Ing. Igor Lacík, DrSc., Ústav polymerů

b) prof. RNDr. Silvia Pastoreková, DrSc.; Virologický ústav

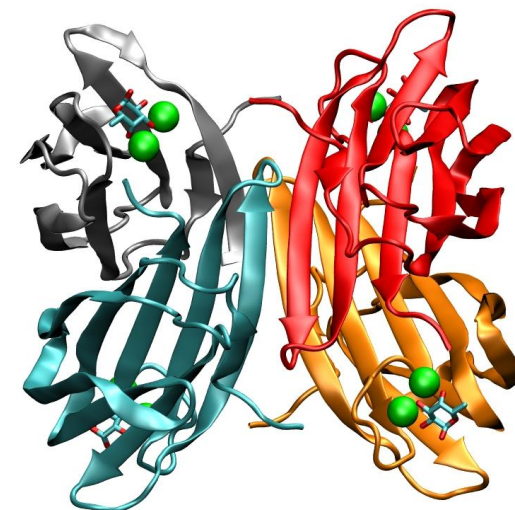


Virtuální screening

Motivace

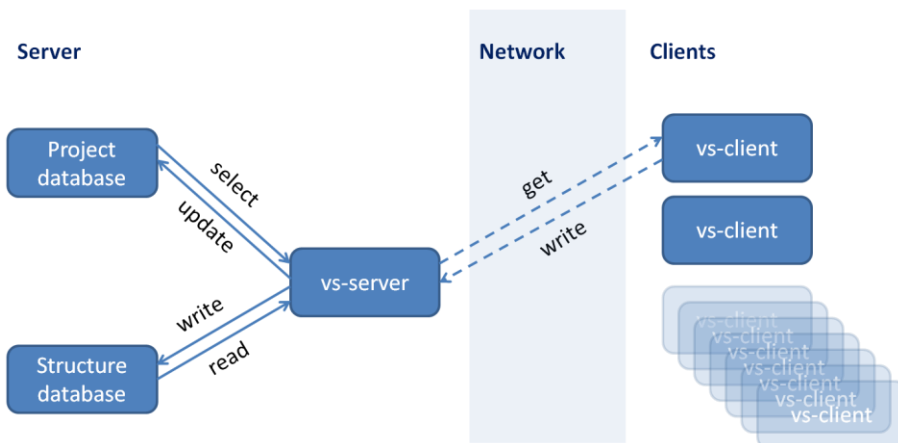


Cíl



Lectin PA-III

Software nástroje



Výkonnost

- Autodock Vina
- heterogenní výpočetní zdroje
- jeden doking cca 1-10 minut/ligand
- ca **900 souběžně běžících úloh**
- rychlost hledání cca **250 000 ligandů za den**

Nemesis

Project: test1

Active profile: Profile 1

Profile: Profile 1

Residue: DG

Editor	Atoms	Serial Index	Local Index	Name	Symbol	Type	X [Å]	Y [Å]	Z [Å]	Ch
		232	1	P	P	P	44.435	16.285	30.110	
		233	2	O1P	O	O2	45.693	16.741	29.607	
		234	3	O2P	O	O2	43.638	15.272	29.407	
		235	4	O5'	O	OS	44.770	15.625	31.489	
		236	5	C5'	C	CI	45.445	16.396	32.453	

Build panel: Basic | General

Geometry: Position | Distance | Angle | Torsion

SubID	Name	Type	ID	Description
0	Na+	Atom	8599	
0	Na+	Atom	8600	

Value: 3.305 Å

Petr Kulhánek, Jakub Štěpán, Milan Lenčo, Petr Balík, Jiří Klusák, Zora Střelcová ...

Shrnutí

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

Kontakty

Laboratoř výpočetní chemie

Národní centrum pro výzkum biomolekul, UKB, Pávilon A4

Semináře LCC skupiny každý čtvrték
v 10 hodin v místnosti A4/2.11

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



C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I – cvičení

C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II

C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II – cvičení