Výpočetní chemie

Skupina LCC

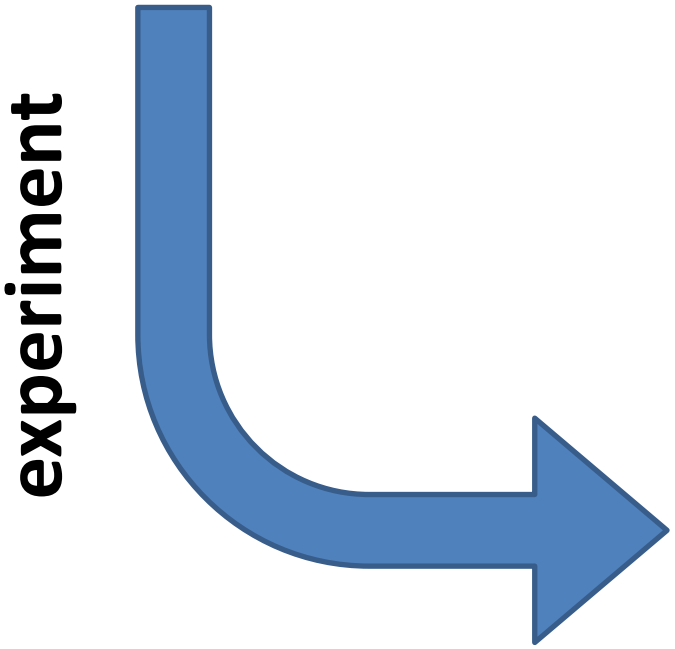
Petr Kulhánek

petr.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

reálný problém
(chování chemického systému na makroskopické úrovni)

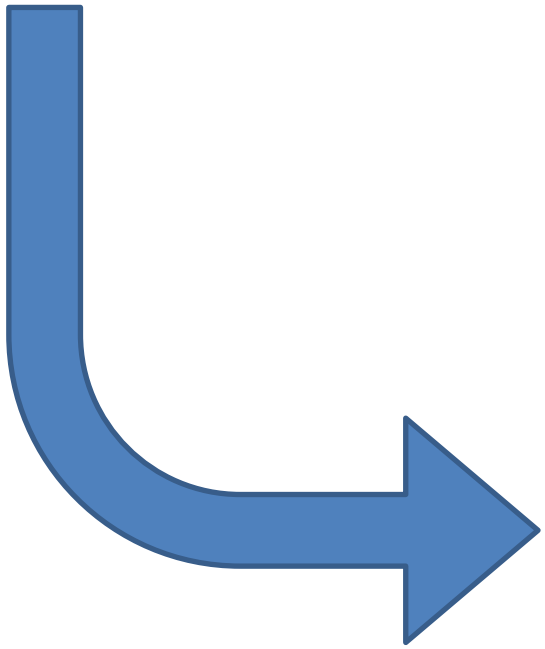


molekulární podstata
(chování chemického systému na mikroskopické úrovni)

Výpočetní chemie

reálný problém
(chování chemického systému na makroskopické úrovni)

experiment



molekulární podstata
(chování chemického systému na mikroskopické úrovni)

$$A = -k_b T \sum_k e^{-\frac{U_k}{k_b T}}$$

a další ....

$$\hat{H}\,\psi_k(\mathbf{r}) = E_k\,\psi_k(\mathbf{r})$$

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = -m_i \frac{\partial V(\mathbf{R})}{\partial r_i}$$

Výpočetní chemie

reálný problém
(chování chemického systému na makroskopické úrovni)

experiment

molekulární podstata
(chování chemického systému na mikroskopické úrovni)

výpočet

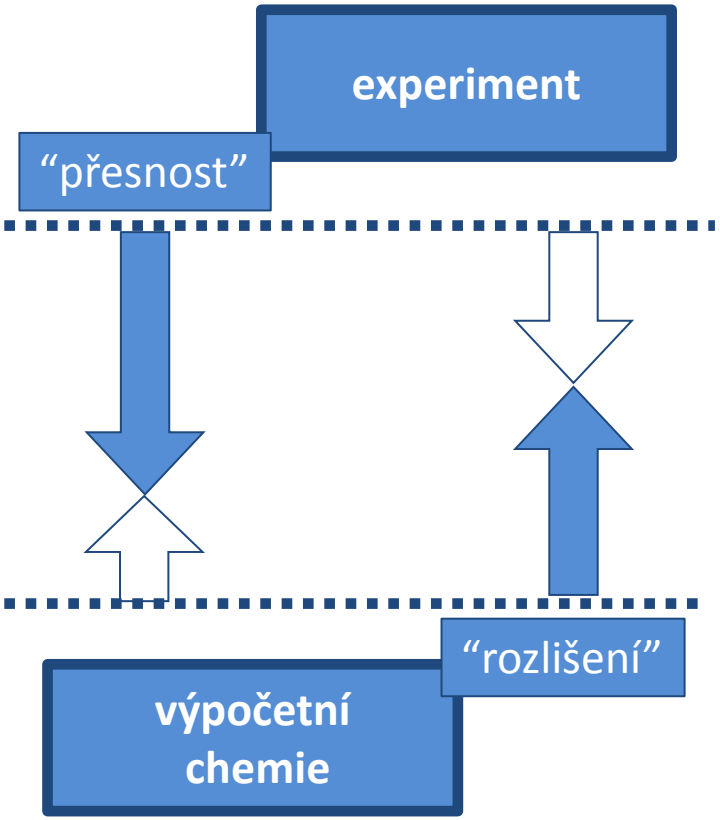
$$A = -k_b T \sum_k e^{-\frac{U_k}{k_b T}}$$

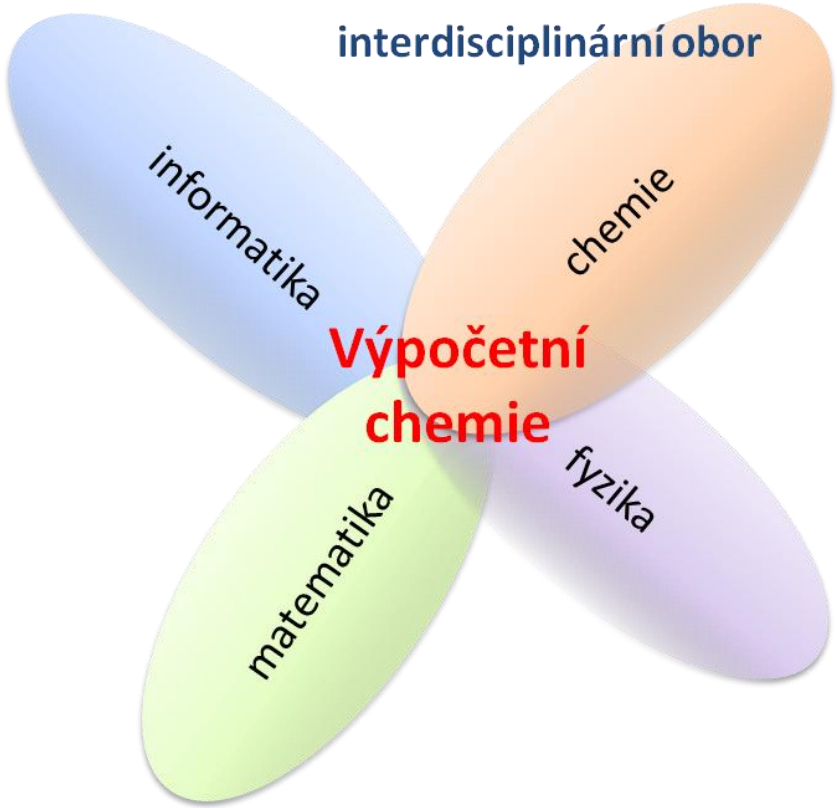
$$\hat{H}\psi_k(\mathbf{r}) = E_k \psi_k(\mathbf{r})$$

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = -m_i \frac{\partial V(\mathbf{R})}{\partial r_i}$$

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.

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, Dockig

RNDr. Radka Svobodová, Ph.D.

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

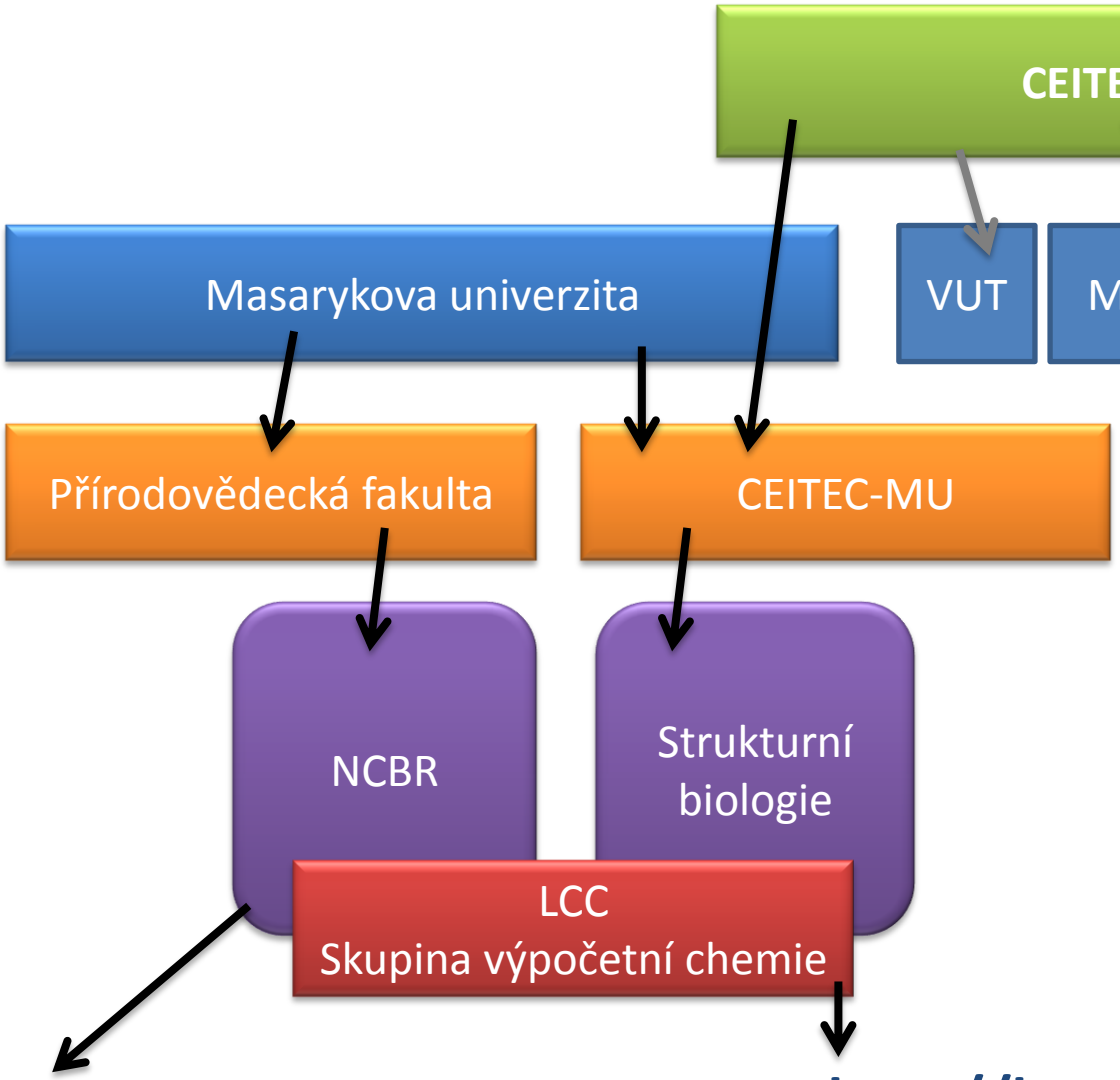
RNDr. Robert Vácha, Ph.D.

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 ...



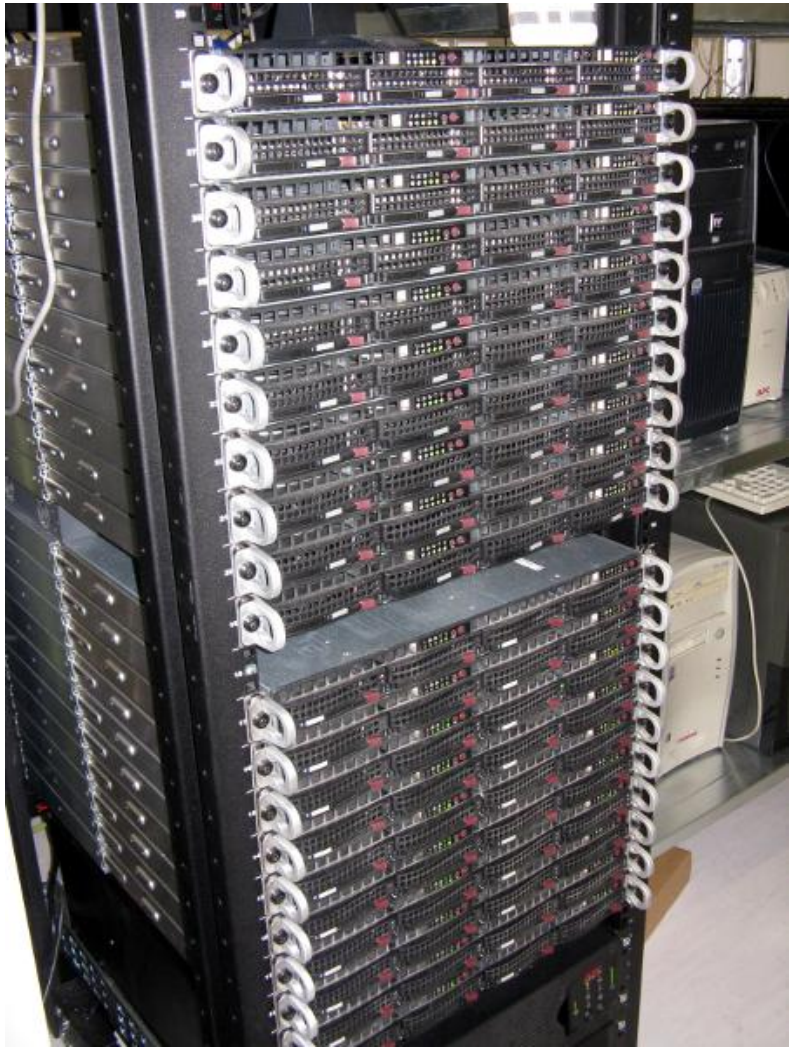
Spolupráce:
Ústav chemie, Ústav biochemie, RECETOX, Skupina Glycobiochemie, Skupina NMR, a další ...

Studijní obory:
Chemie, Biochemie, **Strukturní chemie**, Biomolekulární chemie, Chemoinformatika a bioinformatika

http://ncbr. muni.cz

http://lcc.ncbr. muni.cz

Výpočetní zdroje ....



MetaCentrum/CERIT-SC

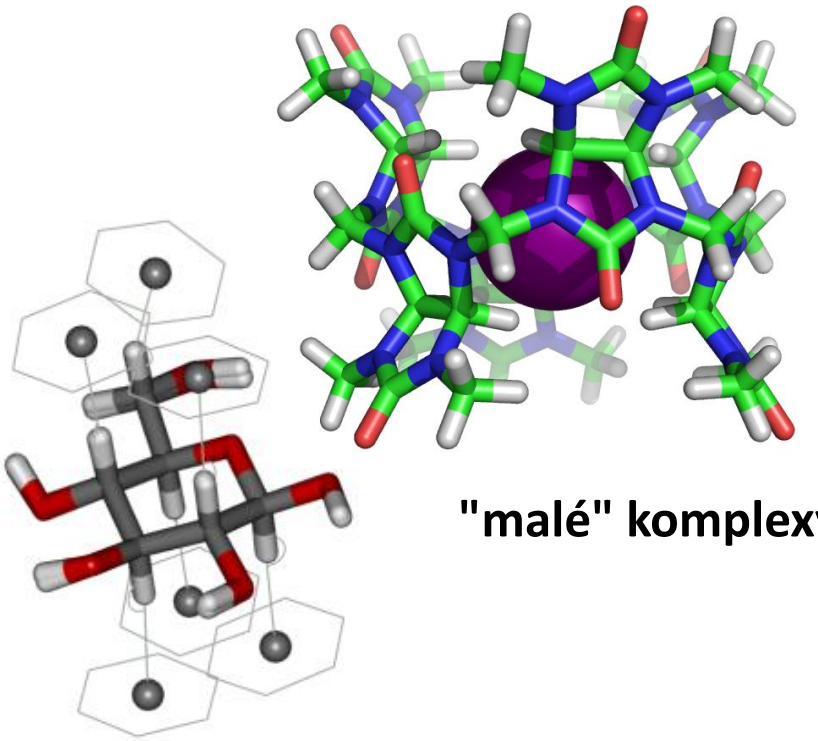
- Národní gridová infrastruktura
- ca 6000 CPU jader
- **CEITEC/NCBR vlastní zdroje cca 1000** CPU jader
- 5 x 100 TB úložných diskových polí

http://www.metacentrum.cz/
http://www.cerit-sc.cz/

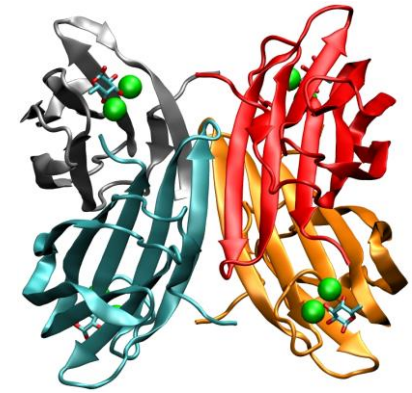
Účet může získat student libovolné vysoké školy.

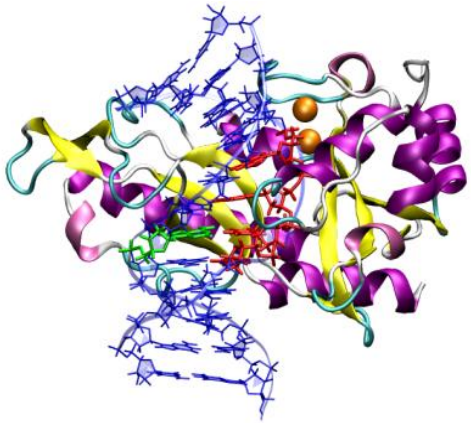
C2110 Operační systém UNIX a základy programování
C2115 Praktický úvod do superpočítání

Co děláme …

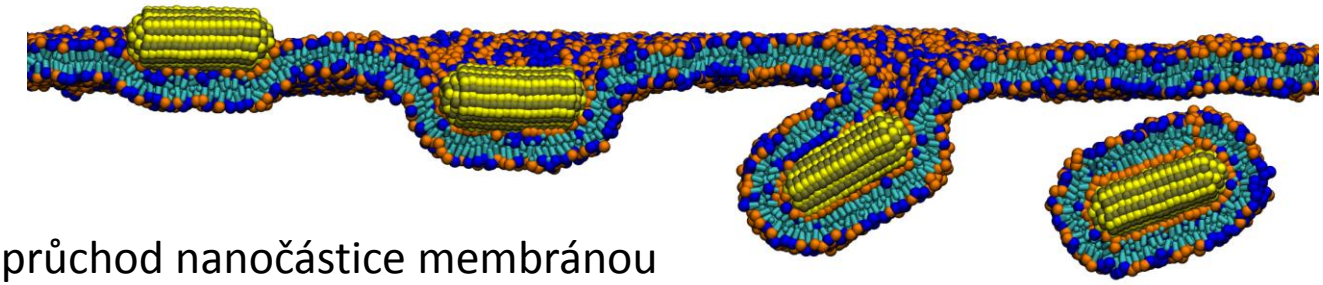


"malé" komplexy





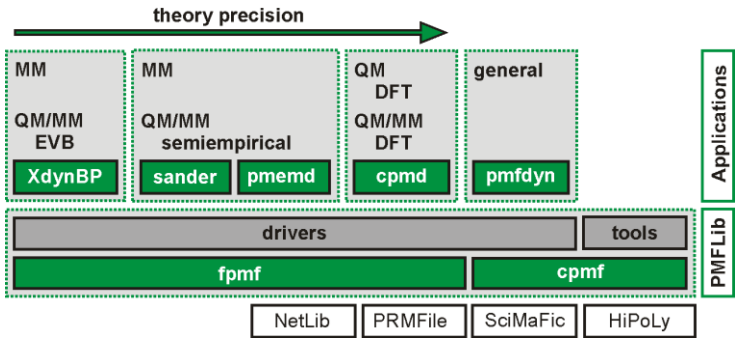
biomolekulární systémy



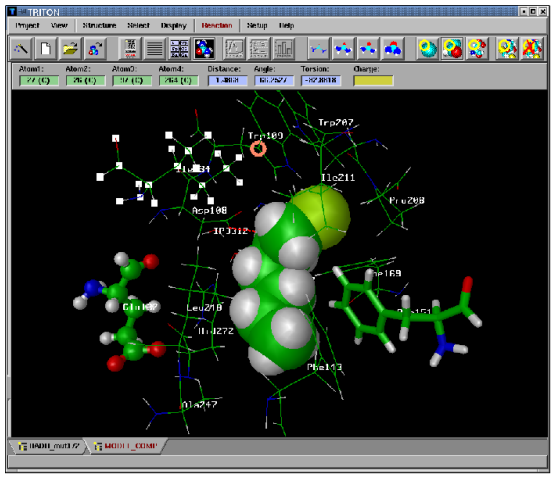
průchod nanočástice membránou

Vyvíjený software

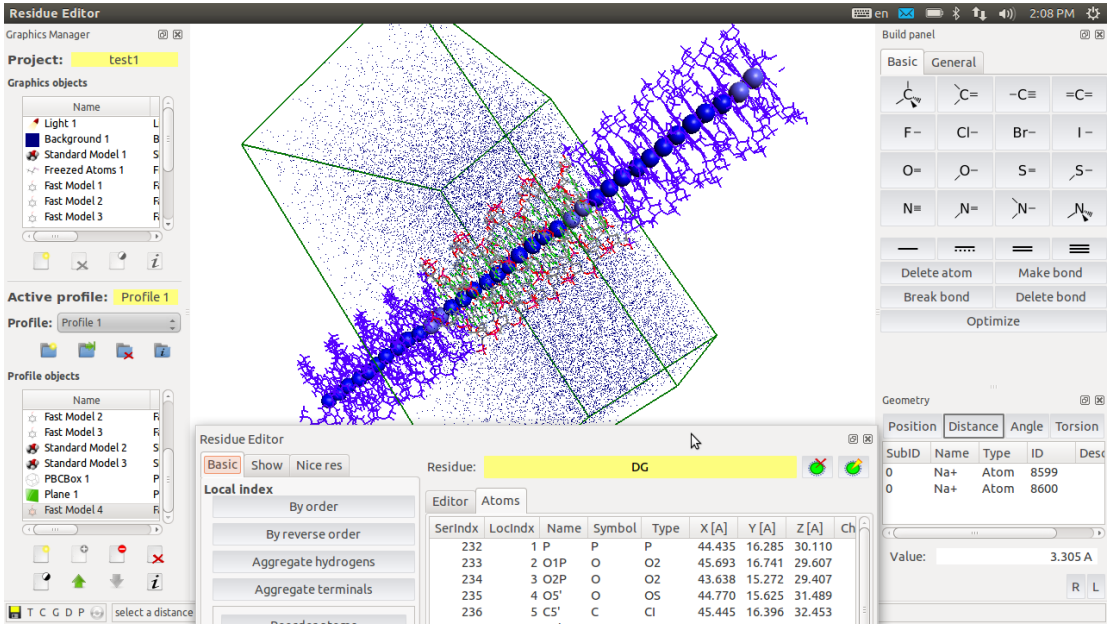
CICADA NEMESIS infinity CATs Triton PMFLib Mole SiteBinder EEM QSPR Designer



TRITON



NEMESIS



Více na: **https://lcc.ncbr.muni.cz**

Kontakty

Laboratoř výpočetní chemie

Národní centrum pro výzkum biomolekul, UKB, Pavilon A4

Semináře LCC skupiny každý čtvrtek 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