

# C7790

# Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

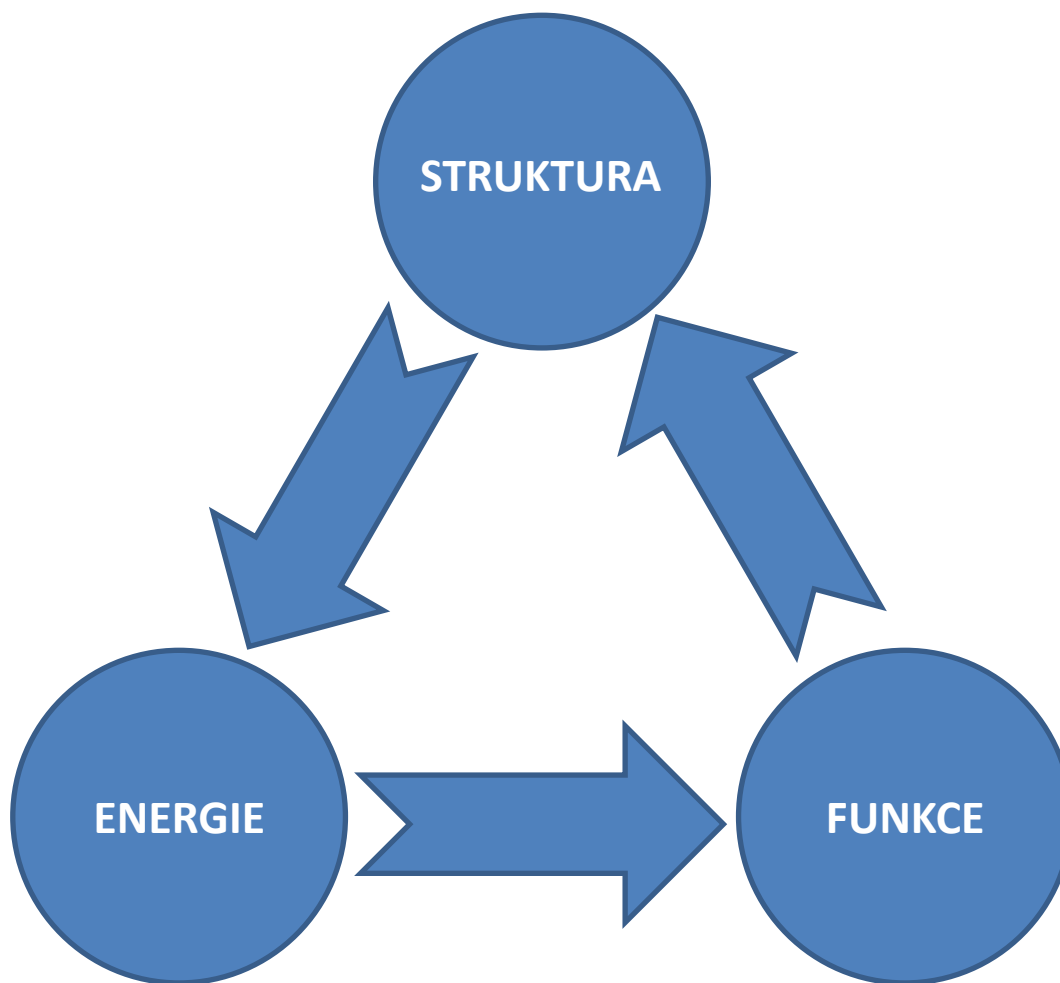
Úvod

Petr Kulhánek

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

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

# Hlavní směrování přednášky



# Obsah - cvičení

- **Stručný úvod do Linuxu**  
pouze minimum pro přežití  
*C2110 Operační systém UNIX a základy programování*
- **Praktické procvičování probírané látky z přednášky**
- **I. Samostatný projekt (monomer a dimer molekuly vody)**  
geometrie a interakční energie (gaussian)
- **II. Samostatný projekt (modelování reakce)**  
mechanismus jednoduché reakce za použití semiempirické kvantově chemické metody (gaussian)
- **III. Samostatný projekt (molekulová dynamika)**  
studium konformačního chování malé organické molekuly (AMBER)

# Harmonogram semestru

**Výuka:** 19. září 2016 – 21. prosince 2016  
**Zkouškové období:** 2. ledna 2017 – 10. února 2017

**1 ECTS kredit -> 26 hodin studijní zátěže**

## **C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I**

**Zakončení:** klasifikovaný zápočet (2+1 kredity), zkouška (2+2 kredity)

**Celkový počet odpřednášených hodin:** 13 x 2 hodiny = 26 hodin

**Celková hodinová zátěž předmětu:** 4 kredity -> 4 x 26 hodin = **104 hodin studijní zátěže**

## **C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I – cvičení**

**Zakončení:** zápočet (1 kredit)

**Celkový počet odpřednášených hodin:** 13 x 1 hodiny = 13 hodin

**Celková hodinová zátěž předmětu:** 1 kredit -> 1 x 26 hodin = **26 hodin studijní zátěže**



**C7790: Samostudium, domácí úlohy, příprava na zkoušku: 78 hodin**

**C7800: Vypracování protokolů: 13 hodin**

**Celkem: 91 hodin**

# Hodnocení znalostí

## Zakončení:

- **tři 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

**C9540** Introduction to Computational Quantum Chemistry

**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