

# 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

# Harmonogram semestru

**Výuka:** 13. září 2021 – 17. prosince 2021

**Zkouškové období:** 3. ledna 2022 – 11. února 2022

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

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

**Zakončení:** zkouška (2+2 kredity)

**Celkový počet odpřednášených hodin:** 14 x 2 hodiny = 28 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:** 14 x 1 hodiny = 14 hodin

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

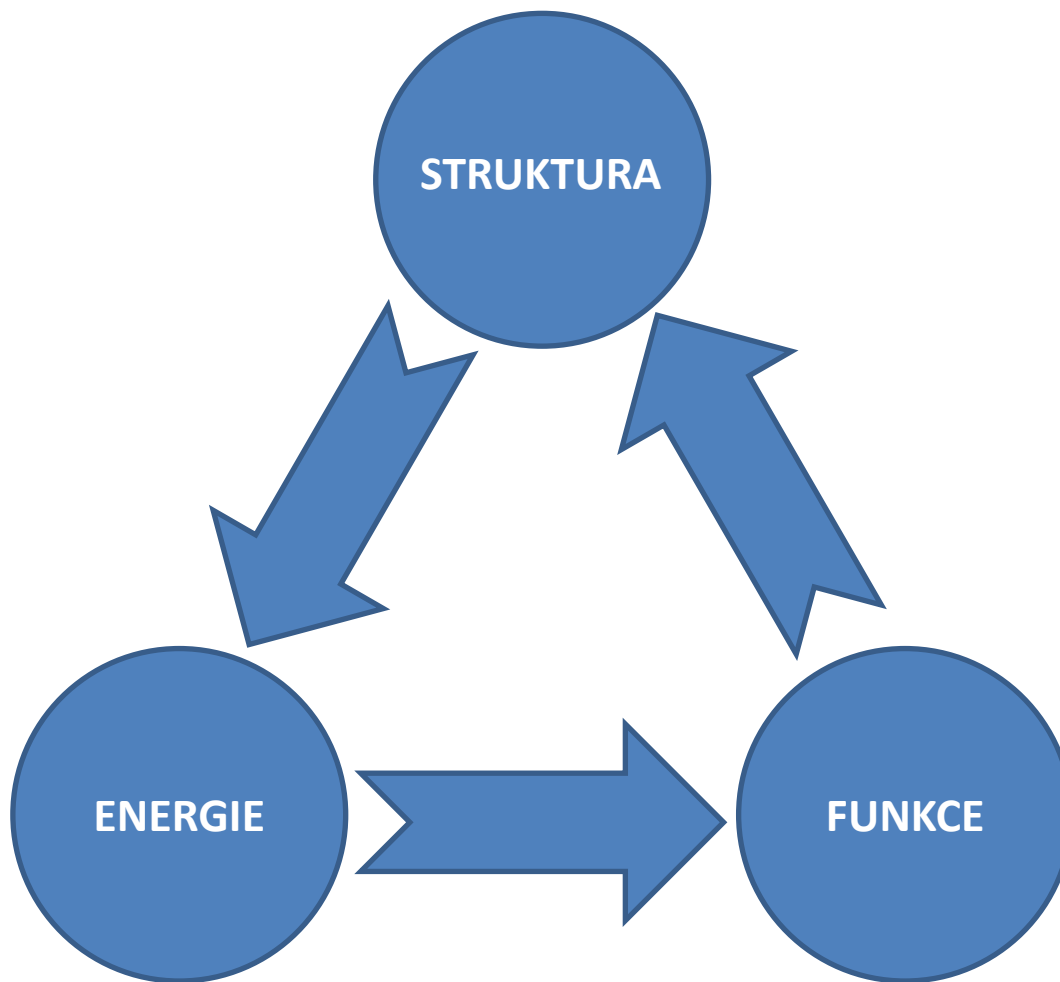


**C7790: Samostudium, domácí úlohy, příprava na zkoušku: 76 hodin**

**C7800: Vypracování protokolů: 12 hodin**

**Celkem: 88 hodin**

# Hlavní směrování přednášky



# Obsah - cvičení

## ➤ Stručný úvod do Linuxu

Podrobněji: C2110 *Operační systém UNIX a základy programování*

C2115 Praktický úvod do superpočítání

## ➤ 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)

# Hodnocení znalostí

## Zakončení:

- **tři velmi stručné reporty (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 ústním pohovorem.