

C7790 Úvod do molekulového modelování

TSM Modelování molekulárních struktur
C7800 Úvod do molekulového modelování - cvičení

0. Úvod

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

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

Harmonogram semestru

Výuka: 12. září 2022 – 16. prosince 2022

Zkouškové období: 2. ledna 2023 – 10. února 2023

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**

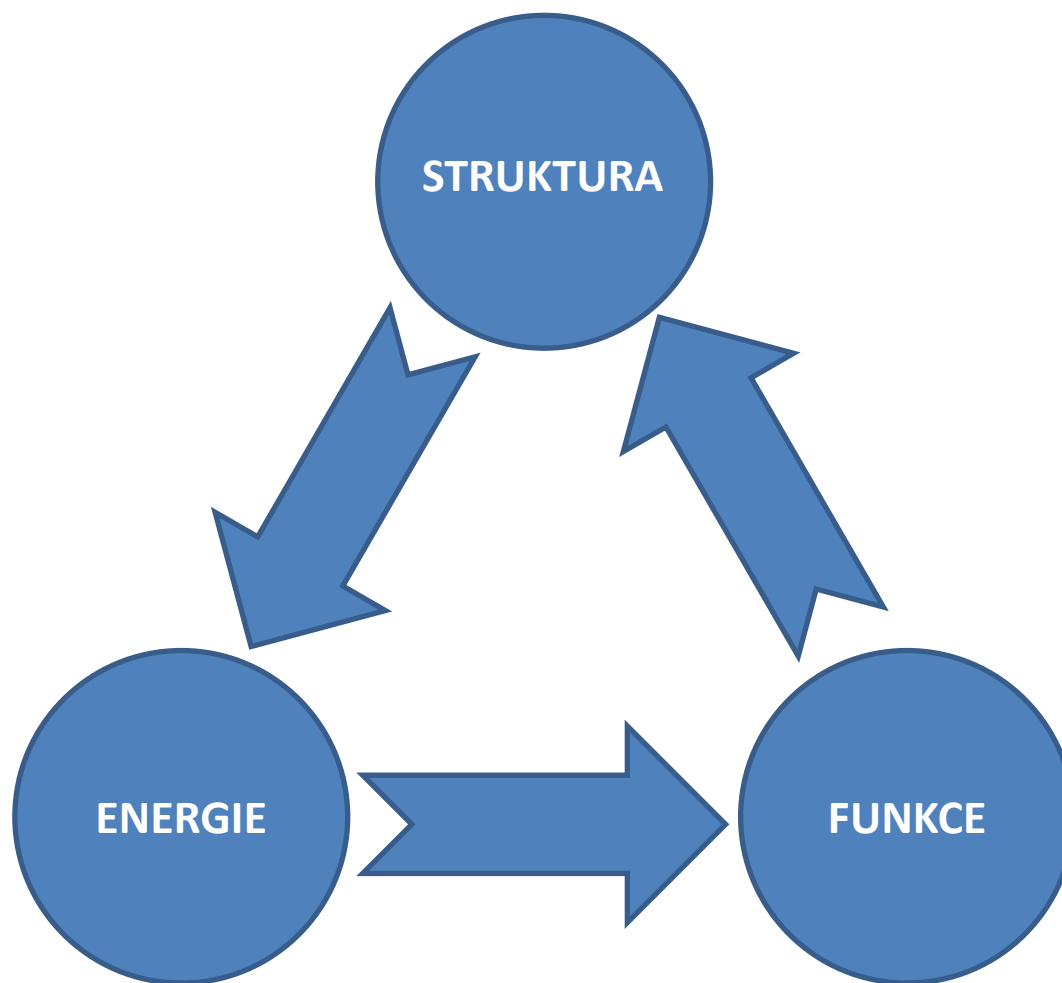


C7790: Samostudium, domácí úlohy, příprava na zkoušku: 76 hodin

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.