

## 2. LETNÍ ŠKOLA TEORETICKÉ A VÝPOČETNÍ CHEMIE, PRAHA, organizovaná Centrem pro komplexní molekulové systémy a biomolekuly

### Komu je škola určena:

Studenti 3-5. ročníků VŠ a PhD studenti přírodovědného zaměření se zájmem o teoretickou a výpočetní chemii a její aplikace.

**Termín konání:** 26. - 30. srpna 2002

**Místo konání:** Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského  
AV ČR  
Dolejškova 3  
182 23 Praha 8

### Stručná charakteristika:

Cílem letní školy je seznámit zejména mimopražské studenty se základy moderních metod teoretické a výpočetní chemie a umožnit jim si vyzkoušet aplikace těchto metod (*například katalýza v plynné a pevné fázi nebo biofyzikální problematika*) v rámci početných cvičení v průběhu školy.

Pět dní intenzivní práce sestávající z vyváženého množství přednášek a cvičení umožní i studentům bez předešlých znalostí kvantové chemie a výpočetní techniky získat určitou představu o možnostech současné kvantové chemie, molekulové dynamiky a statistické termodynamiky. Více informací je možno získat přímo z programu letní školy.

**Ubytování:** Pro účastníky je zajištěno ubytování na koleji "Volha" (VŠCHT Praha), v době od neděle 25. srpna do neděle 1. září.

### Financování letní školy:

Organizátoři uhradí účastníkům ubytování, stravné, kapesné, cestovní náklady a náklady spojené se společenskými aktivitami školy.

**Program letní školy:** Přednášky budou zajištěny vědeckými pracovníky Centra pro komplexní molekulové systémy a biomolekuly:

Úvod do kvantové chemie, *P. Nachtigall (ÚFCH JH, AV ČR)*  
Korelační energie, *P. Nachtigall (ÚFCH JH, AV ČR)*  
Operační systém Unix, *F. Ryjáček (ÚFCH JH, AV ČR)*  
Energetická hyperplocha, *Z. Havlas (ÚOCHB, AV ČR)*  
Kvantově chemické kódy, *Z. Havlas (ÚOCHB, AV ČR)*  
Molekulová mechanika, *J. Vacek (ÚFCH JH, AV ČR)*  
Visualizace a grafika, *J. Vacek (ÚFCH JH, AV ČR)*  
Molekulové interakce, *P. Hobza (ÚFCH JH, AV ČR)*  
Kvantová molekulová dynamika, *P. Jungwirth (ÚFCH JH, AV ČR)*  
Statistická termodynamika, *A. Malijevsky (VŠCHT Praha)*  
Simulace a molekulová dynamika, *J. Vacek (ÚFCH JH, AV ČR)*  
Rotačně vibrační spektroskopie, *V. Špirko (ÚFCH JH, AV ČR)*

Aplikace - ukázky konkrétních aplikací metod teoretické chemie (například, modelování DNA, modelování reakcí na zeolitických katalyzátorech a podobně).

Ke všem přednáškám budou připravena cvičení. Poslední den školy bude vyhrazen pro samostatnou práci na vybraných projektech.

**Studijní materiály:**

V průběhu července budou na www adrese letní školy (popřípadě mohou být účastníkům na vyžádání zaslány) studijní materiály, které jim umožní se s částí probírané problematiky předběžně seznámit.

**Registrace:**

Na www adrese, e-mailem či dopisem do 26. 6. 2002.

V přihlášce uveďte jméno, školu, studovaný obor, ročník, kontaktní adresu, telefon a kvantově chemické přednášky/kurzy, které jste absolvovali.

Vzhledem k možnostem organizátorů (15-20 účastníků školy) si vyhrazujeme právo odmítnout některé účastníky v případě většího zájmu. Přijetí na letní školu bude účastníkům oznámeno e-mailem do 28. 6. 2002.

**Dálší informace:** více informací lze získat na [http://www.jh-inst.cas.cz/sg/letni\\_skola](http://www.jh-inst.cas.cz/sg/letni_skola) a od organizátorů (viz níže).

Za 2. Letní školu teoretické a výpočetní chemie s pozdravem,

Prof. Ing. P. Hobza, DrSc.

e-mail: [pavel.hobza@jh-inst.cas.cz](mailto:pavel.hobza@jh-inst.cas.cz)

Doc. P. Jungwirth, PhD.

e-mail: [pavel.jungwirth@jh-inst.cas.cz](mailto:pavel.jungwirth@jh-inst.cas.cz)

Doc. RNDr. P. Nachtigall, PhD.

e-mail: [petr.nachtigall@jh-inst.cas.cz](mailto:petr.nachtigall@jh-inst.cas.cz)

tel: (02)-6605-3187

fax: (02)-858-2307

adresa: ÚFCH JH

Akademie věd ČR

Dolejškova 3

182 23 Praha 8