

3. LETNÍ ŠKOLA TEORETICKÉ A VÝPOČETNÍ CHEMIE, organizovaná Centrem pro komplexní molekulové systémy a biomolekuly a Ústavem organické chemie a biochemie

Komu je škola určena:

Zejména studentům 3-5. ročníků VŠ přírodovědného zaměření se zájmem o teoretickou a výpočetní chemii a její aplikace.

Termín konání: 30. srpna - 3. září 2004

Místo konání: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Flemingovo nám. 2
166 10 Praha 6

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 29. srpna do neděle 5. září.

Financování letní školy:

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

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

- Úvod do kvantové chemie,
- Korelační energie
- Operační systém Unix
- Energetická hyperplocha
- Kvantově chemické kódy
- Molekulová mechanika
- Visualizace a grafika
- Molekulové interakce
- Kvantová molekulová dynamika
- Statistická termodynamika
- Simulace a molekulová dynamika
- Rotačně vibrační spektroskopie

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. 2004.

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 30. 6. 2004.

Další informace: více informací lze získat na <http://www.molecular.cz/school04.php> a od organizátorů (viz níže).

Za 3. Letní školu teoretické a výpočetní chemie s pozdravem,

Dr. Zdeněk Havlas

e-mail: zdenek.havlas@uochb.cas.cz

Prof. Ing. P. Hobza, DrSc.

e-mail: pavel.hobza@uochb.cas.cz

Doc. P. Jungwirth, PhD.

e-mail: pavel.jungwirth@uochb.cas.cz

Doc. RNDr. P. Nachtigall, PhD.

e-mail: petr.nachtigall@uochb.cas.cz

tel: 220-410-314

fax: 220-410-320

adresa: ÚOCHB

Akademie věd ČR

Flemingovo nám. 2

166 10 Praha 6