

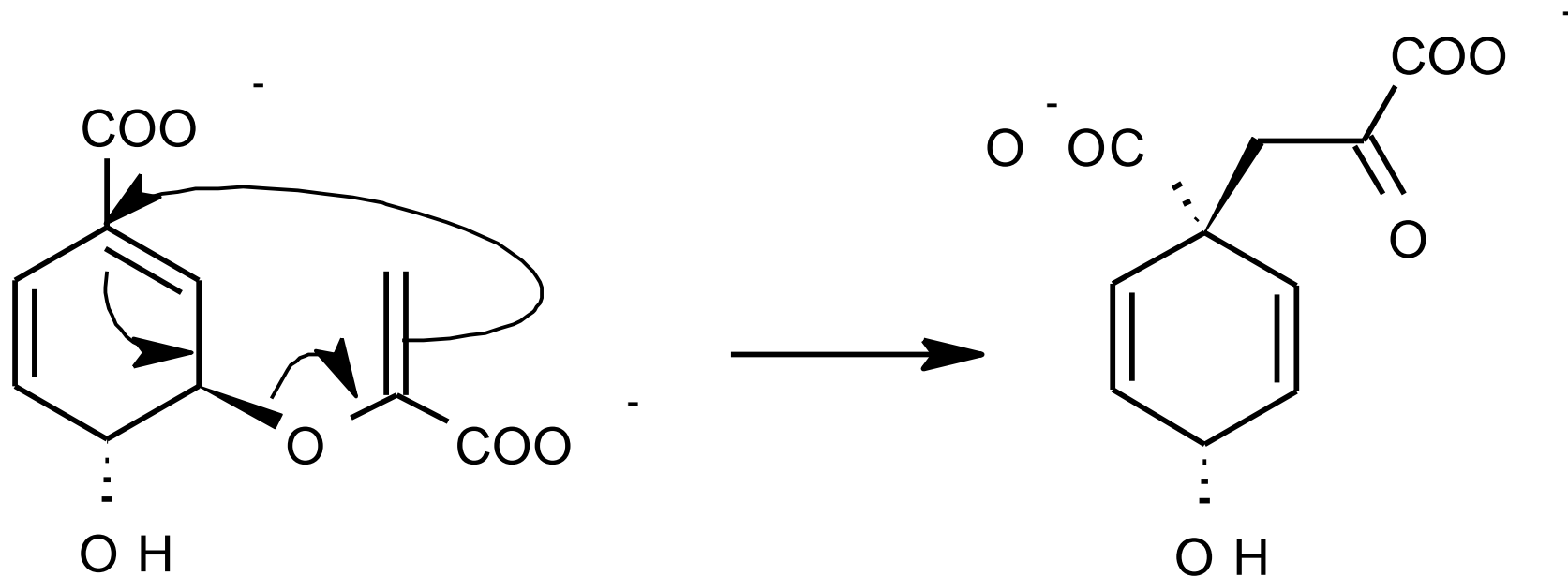
Studium enzymatické reakce metodami výpočetní chemie

2. kolo

Petr Kulhánek, Zora Střelcová

kulhanek@chemi.muni.cz

CEITEC - Středoevropský technologický institut
Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno



**Přeměna chorismátu na prefenát
(modelování reakce ve vakuu)**

I. část
(prerekvizity)

II. část
(molekulová mechanika)

III. část
(klastr WOLF)

IV. část
(kvantová mechanika)

K řešení úlohy můžete využít následující software, který je dostupný buď volně nebo pro akademické použití:

Putty

<http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/>

Implementace SSH (Secure Shell) pro Windows, která umožňuje vzdálené připojení k počítačům podporující tento protokol (převážně unixového a linuxového typu).

WinSCP

<http://winscp.net/eng/docs/lang:cs>

Program pro přenos souborů mezi MS Windows a počítači podporující SFTP či SCP protokoly (převážně unixového a linuxového typu).

Avogadro

http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page

Program pro stavbu a vizualizaci molekul. Volně dostupný pro MS Windows a Linux.

Software, pokračování

VMD

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

Program pro vizualizaci molekul. Po bezplatné registraci dostupný pro MS Windows a Linux.

Gaussian

<http://www.gaussian.com/>

Komerční program určený převážně pro kvantově chemické výpočty. Instalovaný na klastru WOLF.

Klaster WOLF

Na klastru WOLF je nainstalován komerční program **gaussian**. Pro přístup na klaster (rozumí se tím vzdálený přístup po internetu) musíte mít na klastru **účet**, o který si **musíte zažádat**.

Žádost o účet zasílejte e-mailem na adresu:

kulhanek@chemi.muni.cz

Jako předmět zprávy uveďte: **Vibuch – klaster wolf**

V těle zprávy uveďte Vaše **úplné jméno, název a adresu školy**, kde v současnosti studujete.

Co instalovat na svůj počítač

Podle toho, který operační systém používáte, instalujte následující software:

MS Windows:

- Putty
- WinSCP
- Avogadro
- VMD

Ubuntu (linux):

- Avogadro
- `$ sudo apt-get install avogadro`
- VMD