

# Úmluva na seminář (N403049)

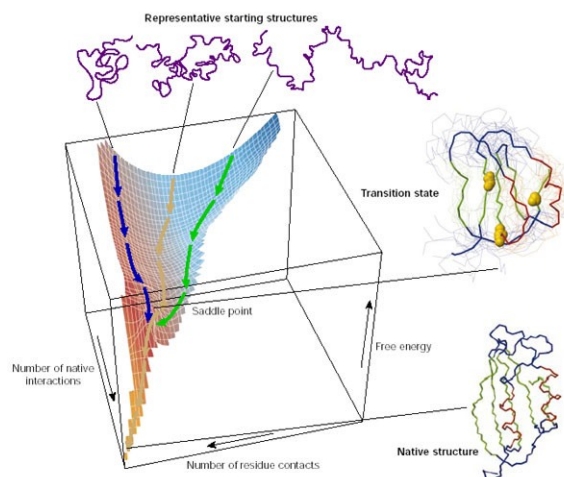
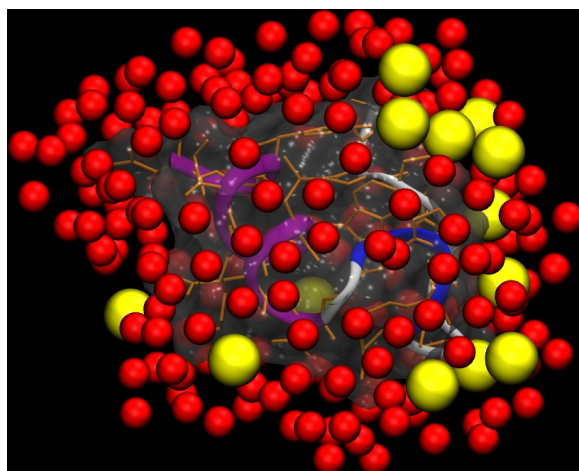
Klasické experimenty fyzikální chemie z pohledu počítačových simulací  
*Experiments of Physical Chemistry in Light of Computer Simulations*

RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.  
(jan.heyda@vscht.cz)

Kde: A324

Kdy: Středa 16.9. 15.00

Jazyk: Angličtina/Čeština



**Sylabus: (90 minut á 14 dní)**

1-2) Úvod do počítačových simulací a jejich analýza

3-4) Termodynamika roztoků

5-6) Stabilita a denaturace proteinů

7-8) Protein folding – Anfinsenova hypotéza

9-10) Hydratace, sorpce, botnání - Mikroskopické aspekty

11-12) Shrnutí a diskuse.

**Anotace:** Série přednášek a diskusí ilustrujících na současných publikacích z oboru *fyzikální chemie vztah experimentu a počítačové simulace*. Hlavní důraz bude kladen na přímé porovnání vlastností měřitelných v simulaci a v experimentu.

**Struktura semináře:** Pro každý seminář bude studentům připravena klíčová publikace, se kterou budou aktivně pracovat a diskutovat během semináře. V první části semináře bude vyučujícím prezentován probíraný problém, a zbytek semináře bude věnován otevřené diskusi.

**Studijní literatura:** Relevantní publikace (v angličtině) z mezinárodních časopisů.