

<b>Simulation von Biomolekülen (BioSim)</b>					Stand: 15.05.2018	
Studiengang: M. Sc. Chemie					Modus: Wahlpflicht	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer		Turnus	Studiensemester	
8	240	Blockmodul (März)		WiSe	3.	
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
Simulation von Biomolekülen		V	2	60	30	30
BioSim-Praktikum		PExp	6	130	90	30
BioSim-Seminar		Sem	1	45	15	30
Modulverantwortlicher		Jun. Prof. Dr. Birgit Strodel				
Beteiligte Dozenten		Jun. Prof. Dr. Birgit Strodel				
Sprache		deutsch, englisch auf Wunsch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Chemie B. Sc. Wirtschaftschemie M. Sc. Wirtschaftschemie B. Sc. Biochemie M. Sc. Biochemie			Qualifikation Qualifikation Wahlpflicht Qualifikation Wahlpflicht	
Lernziele und Kompetenzen		<p>Nach erfolgreichem Abschluss dieses Moduls können die Studierenden</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Proteine und andere Biomoleküle mit der Software VMD visualisieren,</li> <li>• die Theorie hinter Molekulardynamik(MD)-Simulationen nachvollziehen,</li> <li>• MD-Simulationen von Proteinen mit der Software GROMACS durchführen und diese auswerten,</li> <li>• englischsprachige Publikationen über biomolekulare Simulationen verstehen und diese in einem Vortrag vorstellen.</li> </ul>				
Inhalte		<p><u>Vorlesung:</u></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Biomolekulare Kraftfelder</li> <li>2. Berechnung nichtkovalenter Wechselwirkungen</li> <li>3. Geometrieoptimierung</li> <li>4. Molekulardynamik (MD)-Simulationen: Theorie, MD mit dem Programm GROMACS, Auswertung von MD-Simulationen, Methoden zur Berechnung von freien Energien (z.B. Replica-Exchange-MD und Umbrella-Sampling-MD)</li> <li>6. Monte-Carlo-Simulationen, inklusive globaler Optimierung</li> <li>7. QM/MM-Simulationen, mit Anwendungen auf Enzyme</li> </ol> <p><u>Seminar:</u></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Analyse einer Publikation zum Thema biomolekulare Simulation und eigene Simulationen zu dieser Publikation</li> <li>2. Vorstellen der Publikation und der eigenen Simulationsergebnisse in einem Seminarvortrag (30 Minuten, Powerpoint)</li> </ol> <p><u>Computerpraktikum:</u></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Einführung in Linux, die Benutzung des MD-Programms GROMACS, des QM/MM-Programms ChemShell und des Programms VMD zur Darstellung von Biomolekülen</li> <li>2. Bearbeitung von praktischen Übungen zu den Themen der Vorlesung am PC unter Linux. Die Übungsaufgaben werden selbstständig bearbeitet.</li> <li>3. Protokolle zu den Übungen. Die Protokolle werden korrigiert und besprochen.</li> </ol>				

Teilnahmevoraussetzungen	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen PC0 und QCCC (oder äquivalente Leistungen)		
Studienleistungen (u.a. als Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung)	Bearbeitung von Übungen im Rahmen des Computerpraktikums inklusive Protokolle, Seminarvortrag		
Prüfungen	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
Stellenwert der Note für die Endnote			8/135
Medienformen	Tafel, Powerpoint, Computer		
Webseite	<a href="http://www.chemie.uni-duesseldorf.de/lehre_de__.html">http://www.chemie.uni-duesseldorf.de/lehre_de__.html</a>		
Literatur	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Skript zur Vorlesung</li> <li>2. Fachbücher: <ul style="list-style-type: none"> <li>- T. Schlick, "Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide." Springer, New York.</li> <li>- A.R. Leach, "Molecular Modeling – Principles and Applications." Prentice Hall, Harlow.</li> <li>- D. Frenkel, B. Smit, "Understanding Molecular Simulation", Academic Press, San Diego</li> </ul> </li> <li>3. Spezialliteratur zu Seminarthemen wird ausgegeben.</li> </ol>		