

<b>Molekülmodellierung (MoMo)</b>					Stand: 14.11.2014	
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer			Turnus	
8	240	3 Wochen			WS	
<b>Lehrveranstaltungen</b>		Typ	Umfang [SWS]	Präsenz [h]	Eigenstud. [h]	Gruppengr.
Simulation von Biomolekülen		V	2	30	60	30
Seminar		S	1	15	15	30
Computerpraktikum		PExp	6	90	30	15
<b>Modulverantwortlicher</b>		Jun. Prof. Dr. B. Strodel				
<b>Beteiligte Dozenten</b>		B. Strodel, W. Thiel				
<b>Sprache</b>		Deutsch				
<b>Verwendbarkeit des Moduls</b>		Studiengang			Modus	
		M.Sc. Biochemie			Wahlpflicht	
		M.Sc. Biologie				
<b>Lernziele und Kompetenzen</b>						
Grundlegendes Verständnis und praktische Anwendung von Computersimulationsmethoden für Biomoleküle, insbesondere für Proteine						
<b>Inhalte</b>						
<p><b>Vorlesung:</b> 1. Biomolekulare Kraftfelder: Annahmen und Grundlagen; Funktionale Form: bindende und nichtkovalente Beiträge; Parameterisierung; Übliche Kraftfelder: CHARMM, AMBER, GROMOS, OPLS; Ausblick: "Knowledge-based" und "coarse-grained"-Kraftfelder.</p> <p>3. Berechnung nichtkovalenter Wechselwirkungen: Reduktion des Rechenaufwandes: "Cutoff"-, Ewald- und Multipolmethoden; Solvation mit Kontinuumsmethoden.</p> <p>4. Geometrieoptimierung: Überblick über verschiedene Minimierungsmethoden</p> <p>5. Molekulardynamik (MD) - Grundlagen: Grundlagen; Integration der Newtonschen Bewegungsgleichungen; MD in verschiedenen Ensembles: konstante Temperatur (Thermostate: Berendsen und Nosé-Hoover) und konstanter Druck; Auswertung von MD-Simulationen (Freie Energie, Ordnungsparameter, Hauptkomponentenanalyse); MD-Programm: GROMACS</p> <p>6. Molekulardynamik – Weitere Themen: Langevin-Dynamik; Brownsche Dynamik; MD unter Zwangsbedingungen; Umbrella Sampling; "Replica exchange MD".</p> <p>7. Monte-Carlo (MC)-Simulationen: Idee; Metropolis-Methode; Generation von Versuchskonformationen; MC zur globalen Optimierung.</p> <p>8. QM/MM-Simulationen: Konzept; Einbettungsverfahren; Behandlung der QM/MM-Grenzregion; QM/MM-Optimierungs- und Simulationsverfahren; QM/MM-Methoden für elektronisch angeregte Zustände; Übersicht über Anwendungen auf Enzyme und photoaktive Proteine.</p> <p><b>Seminar:</b> Bearbeiten von Übungen zu den Themen der Vorlesung. Die Übungsaufgaben werden selbständig bearbeitet und gemeinsam mit der Darstellung der Lösungswege besprochen. Seminarvortrag</p> <p><b>Praktikum:</b> 1. Einführung in Linux, die Benutzung des MD-Programms GROMACS, des QM/MM-Programms ChemShell und des Programms VMD zur Darstellung von Biomolekülen; 2. Bearbeitung von praktischen Übungen zu den Themen der Vorlesung am PC unter Linux</p>						
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b>		Grundlegende Kenntnisse der Physikalischen Chemie, der Quantenchemie, der statistischen Thermodynamik und der Proteinbiochemie				
<b>Studienleistungen</b>		Bearbeitung von Aufgaben am Computer; Seminarvortrag				
<b>Prüfung und Bewertung</b>		Prüfungsform		Dauer [min]	Gewichtung in Modulnote	
		Klausur (Abschlussprüfung)		90	70%	
		Seminarvortrag		30	30%	
<b>Gewichtung in Gesamtnote</b>		gewichtet nach Leistungspunkten; 8 von ca. 100 benoteten LP bzw. 8%				
<b>Webseite</b>		<a href="http://www.theochem.hhu.de/lehre.html">http://www.theochem.hhu.de/lehre.html</a>				
<b>Literatur</b>		<p>Skript zur Vorlesung</p> <p>T. Schlick, "Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide."</p> <p>A.R. Leach, "Molecular Modeling – Principles and Applications."</p> <p>- D. Frenkel, B. Smit, "Understanding Molecular Simulation", Academic</p> <p>- H. M. Senn, W. Thiel, Angew. Chem. Int. Ed. 2009, 48, 1198.</p> <p>Spezialliteratur zu Seminarthemen wird ausgegeben.</p>				