

Importmodul:

[CW-N.3] <i>Introduction to Biomolecular Simulations</i>	Modellierung und Simulation von Biomolekülen	Wahlpflichtmodul	6 CP (insg.) = 180 h				4 SWS
			Kontaktstudium 4 SWS / 60 h		Selbststudium 120 h		
Inhalte							
<p><u>Vorlesung:</u> Review of probability theory; Primer in equilibrium statistical mechanics, with review of the necessary classical mechanics and mathematics. Highlights on structures as free energy minimizer; Introduction to stochastic phenomena. Gaussian noise, Brownian motion, diffusion (Fokker-Planck equation); Two state systems: from Ion channels to cooperative binding; Kramer's theory for thermally activated processes. Protein folding; Numerical simulations. Euler algorithm for Brownian motion.</p> <p>Introduction to MD + equilibrium MD; Molecular dynamics. Scales in time and space. Atomistic and coarse-grained MD; Biophysical Interactions, all-atom Force fields and coarse grain force field (Martini); Production code and parallel computing. Introduction to GROMACS; Predicting biophysical properties; Periodic boundary conditions. Ewald's summation for electrostatics; Thermostats & Barostats; Visualizing Biophysical Systems; Molecular simulations of biological systems.</p> <p>Übung: Zur Vertiefung des Vorlesungsstoffs wird die Vorlesung von einer praktischen Übung und eigenständiger Literaturarbeit begleitet.</p>							
Lernergebnisse / Kompetenzziele							
<p>Understand the basic principles of equilibrium and out-of-equilibrium statistical mechanics.</p> <p>Understand the principles of molecular dynamics simulations and the technical details involved in the setup of MD simulations. Perform basic molecular dynamics simulations of biological systems. Calculate biophysical properties of biomolecules to help the interpretation of the experimental data.</p>							
Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls							
Keine							
Empfohlene Voraussetzungen							
Grundkenntnisse der Thermodynamik und Statistik							
Organisatorisches							
Importmodul, es gelten die Anmelde- und Rücktrittsfristen der Ordnung der Masters Biophysik. (Die Prüfung erfordert eine online Anmeldung, spätestens sieben Tage vor dem Prüfungstermin. Bis ein Werktag vor dem Prüfungstermin ist der Rücktritt ohne Angabe von Gründen möglich.)							
Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)		M.Sc. Biophysik / FB13					
Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge		M.Sc. Biochemie, M.Sc. Chemie / FB 14					
Häufigkeit des Angebots		Einmal im Jahr (im Sommersemester)					
Dauer des Moduls		1 Semester					
Modulbeauftragte / Modulbeauftragter		Dr. Nadine Schwierz-Neumann (Prof. Hummer)					
Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen							
Teilnahmenachweise		Übung: Regelmäßige und aktive Teilnahme, Bearbeitung der Übungen					
Leistungsnachweise							
Lehr- / Lernformen		Vorlesung, Übung					
Unterrichts- / Prüfungssprache		Englisch					
Modulprüfung		Form / Dauer / ggf. Inhalt					
Modulabschlussprüfung bestehend aus:		Schriftliche Abschlussprüfung (Klausur 90 Min.)					
kumulative Modulprüfung bestehend aus:							
Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:							
		LV-Form	SWS	Semester CP			
				1	2	3	4
	Modellierung und Simulation von Biomolekülen	V	2		3		
	Modellierung und Simulation von Biomolekülen	Ü	2		3		
	SUMME		4	6			