

Introduction to Biomolecular Simulations	Wahlpflichtmodul	6 CP (insg.) = 180 h		4 SWS
		Kontaktstudium 4 SWS / 60 h	Selbststudium 120 h	
Inhalte				
<p>Theoretical background</p> <ul style="list-style-type: none"> • 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. <ul style="list-style-type: none"> ◦ Kramer's theory for thermally activated processes. Protein folding. • Numerical simulations. Euler algorithm for Brownian motion. • Practicum <p>Molecular dynamics simulations</p> <ul style="list-style-type: none"> • 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. • Practicum <ul style="list-style-type: none"> ◦ Visualizing Biophysical Systems ◦ Molecular simulations of biological systems. 				
Lernergebnisse / Kompetenzziele				
<p>Understand the basic principles of equilibrium and out-of-equilibrium statistical mechanics. 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				
Organisatorisches				
Zur Vertiefung des Vorlesungsstoffs wird die Vorlesung von einer praktischen Übung und eigenständiger Literaturlarbeit begleitet.				
Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)		Master Biophysik / FB13		
Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge		Wahlpflichtmodul für Studierende der Masterstudiengänge Physik, Biophysik, Chemie, Biochemie		
Häufigkeit des Angebots		einmal pro Jahr im SoSe		
Dauer des Moduls		1 Semester		
Modulbeauftragte / Modulbeauftragter		Dr. Nadine Schwierz-Neumann and Dr. Roberto Covino		
Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen				
Teilnahmenachweise				
Leistungsnachweise		erfolgreiche Bearbeitung der praktischen Übung		
Lehr- / Lernformen		Vorlesung, Übung		
Unterrichts- / Prüfungssprache		Englisch		
Modulprüfung		Form / Dauer / ggf. Inhalt		

Modulabschlussprüfung bestehend aus:		Mündliche Abschlussprüfung (20 Min – 40 Min .) oder einer Klausur (45-120 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+Ü	2+2	6			
	Modulprüfung						
	SUMME		4	6			