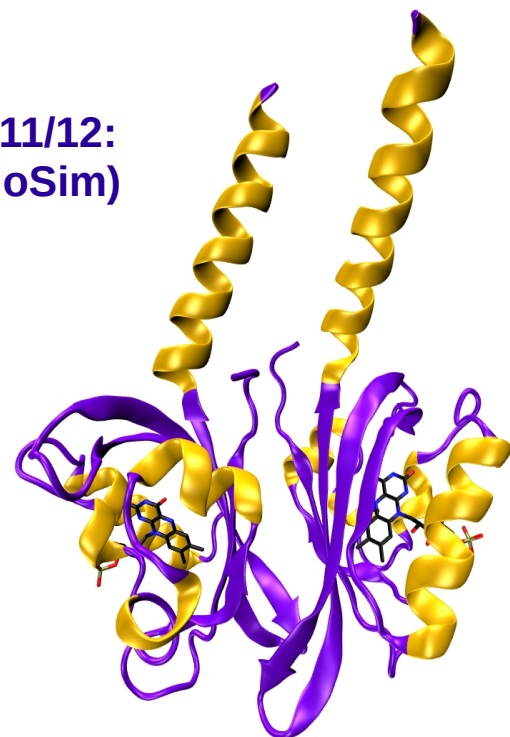


Vorlesung im Wintersemester 2011/12: Simulation von Biomolekülen (BioSim)

12. März – 30. März 2012



Vorlesung: 2 SWS
Übungen: 1 SWS
Praktikum: 5 SWS
Kreditpunkte: 8

Ort: 12.-23.03.12 Theoretische Chemie
26.-30.03.12 MPI Mülheim

Vorlesung:

1. Biomolekulare Kraftfelder
2. Geometrieoptimierung: Übersicht über verschiedene Minimierungsmethoden
3. Molekulardynamik: Grundlagen und weiterführende Themen
4. Monte-Carlo-Simulationen
5. Biomolekulare Simulationen: Aufgabenfelder
6. QM/MM Simulationen (Prof. Thiel, MPI Mülheim)

Computerpraktikum:

1. Einführung in Linux, die Benutzung des MD-Programms GROMACS und des Graphikprogramms VMD zur Darstellung von Biomolekülen
2. Bearbeitung von praktischen Übungen zu den Themen der Vorlesung am PC unter Linux

Seminar und mündliche Prüfung:

Seminarvortrag (30 Minuten, Powerpoint)
Mündliche Prüfung (30 Minuten)

Dozenten:

Jun.-Prof. Dr. Birgit Strodel

Forschungszentrum Jülich

Email: b.strodel@fz-juelich.de

<http://www.strodel.info>

Prof. Dr. Walter Thiel

MPI für Kohlenforschung
Mülheim an der Ruhr

Email: thiel@kofo.mpg.de

<http://www.kofo.mpg.de/de/forschung/theoretische-chemie>

Anmeldung:

Email b.strodel@fz-juelich.de