

---

**Modulbezeichnung:** **Molecular Modelling (MSV-6L)** **5 ECTS**  
(Molecular modelling)

Modulverantwortliche/r: Dirk Zahn  
Lehrende: Dirk Zahn, Nico van Eikema Hommes

---

Startsemester: WS 2019/2020	Dauer: 2 Semester	Turnus: jährlich (WS)
Präsenzzeit: 90 Std.	Eigenstudium: 60 Std.	Sprache: Deutsch

---

**Lehrveranstaltungen:**

Molecular Modelling (V/UE) (WS 2019/2020, Vorlesung mit Übung, Nico van Eikema Hommes et al.)  
Molecular Modeling PRA (SS 2020, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Nico van Eikema Hommes et al.)

---

**Es wird empfohlen, folgende Module zu absolvieren, bevor dieses Modul belegt wird:**

Biochemie und Molekularbiologie I und II

---

**Inhalt:**

**MM:**

Kraftfelder, Molekülmechanik, Molekulardynamik, Einführung in die Modellierung komplexer Systeme. Molekulare Modellierung von Proteinen, Solvatation, Faltung und Protein-Wirkstoff Wechselwirkungen. Konzepte von Hybrid- und Coarse-graining Methoden zur Überwindung von Zeit- und Längenskalen.

**Praktikum:**

Einführung in Modelling-Techniken und Visualisierung, Durchführung von einfachen Rechnungen und Analyse komplexer Simulationen, Strukturdefinition, -optimierung, Moleküldynamik, Einführung in die praktische Durchführung von Hartree-Fock-Rechnungen und die Anwendung von semiempirischen Methoden, Parametrisierung und Anwendung von Kraftfeldern, Energieprofile, Übergangszustände, Coarse-graining und Hybridmethoden.

**Lernziele und Kompetenzen:**

Die Studierenden

- sind in der Lage Molecular Modeling Programme selbstständig anzuwenden
- können auch komplexe Fragestellungen auf geeignete molekulare Modellsysteme übertragen
- sind fähig Kraftfeld, Semiempirik, Dichtefunktional- und ab initio Berechnungen selbstständig durchzuführen
- sind in der Lage, Moleküldynamische Simulationen durchzuführen, zu analysieren und Gleichgewichtsstrukturen bzw. Übergangszustände zu identifizieren.

---

**Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:**

Das Modul ist im Kontext der folgenden Studienfächer/Vertiefungsrichtungen verwendbar:

**[1] Molecular Science (Bachelor of Science)**

(Po-Vers. 2013 | NatFak | Molecular Science (Bachelor of Science) | Vertiefungsrichtung Nano Science / Life Science | Vertiefungsrichtung Life Science | Molecular Modelling)

---

**Studien-/Prüfungsleistungen:**

Molecular Modelling (Prüfungsnummer: 30611)

(englische Bezeichnung: Molecular Modelling)

Prüfungsleistung, mehrteilige Prüfung

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

weitere Erläuterungen:

PFP:

Molecular Modelling: \*W90 (PL)= Schriftliche Prüfung (90 Minuten) oder Alternativ-Prüfung, gemäß Corona-Satzung der FAU!

Seminar Molecular Modelling: EX (PL)

Praktikum Molecular Modelling: LAB (PL)

Berechnung der Modulnote: W90 (PL)\* 50%, EX (PL) 25%, LAB (PL) 25%

Prüfungssprache: Deutsch

Erstablingung: WS 2019/2020, 1. Wdh.: WS 2019/2020

1. Prüfer: Dirk Zahn

---

**Organisatorisches:**

**Achtung:**

Erstablingung der Klausur erfolgt im Wintersemester, die 1. Wiederholungsmöglichkeit dann im Sommersemester;

Notenverbuchung von Klausurnote und Praktikumsleistungen erfolgt erst im Sommersemester!

Bitte beachten: Im SoSe 2020 finden die Lehrveranstaltungen voraussichtlich **online** statt, melden Sie

sich dazu bitte auf **StudOn** an, um weitere Informationen zu bekommen: [https://www.studon.fau.de/crs2554439\\_join](https://www.studon.fau.de/crs2554439_join).

**Bemerkungen:**

Verwendbarkeit des Moduls: B.Sc. Molecular Science (Vertiefungsrichtung Lifescience)