

Studiengang:	Bachelor Bioinformatik
Modulbezeichnung:	Computational Chemistry
ggf. Kürzel:	Bi-B-4
ggf. Untertitel:	-
ggf. Lehrveranstaltungen:	Vorlesung Computational Chemistry Übung Computational Chemistry
Semester:	4. - 6. Semester Bachelor
Angebotsturnus:	jährlich im Sommersemester
Modulverantwortliche(r):	Prof. Dr. Volkhard Helms
Dozent(in):	PD Dr. Michael Hutter, Prof. Dr. Volkhard Helms
Sprache:	Deutsch
Zuordnung zum Curriculum:	Wahlpflichtmodulelement der Kategorie „Vorlesungen der Bioinformatik“
Lehrform / SWS:	Vorlesung: 2 SWS Übungen: 2 SWS
Arbeitsaufwand:	180 h = 60 h Präsenz- und 120 h Eigenstudium und Bearbeitung der Übungsaufgaben
Kreditpunkte:	6
Voraussetzungen:	Kenntnisse des Inhalts von Allgemeine Chemie und Organische Chemie
Lernziele / Kompetenzen:	<p>Die Studierenden werden in der Vorlesung mit den aktuellen Methoden aus dem Bereich Computational Chemistry vertraut gemacht, die in der Bioinformatik zum Beispiel in den Bereichen Molecular Modeling, Docking, Moleküldynamik, Virtual Screening und Quantitative Structure Activity Relationships (QSAR) verwendet werden. Sie sollen dadurch fachübergreifende theoretische und praktische Kompetenzen erlangen, sowie Methoden und Ergebnisse aus der Computational Chemistry für den Bereich der Bioinformatik und Chemoinformatik zu verstehen und beurteilen zu können.</p> <p>Dazu lernen die Studenten Kenntnisse und Methoden aus der Chemie und Physik auf bioinformatische und biologische Probleme anzuwenden. Eine wichtige Funktion bei der Vertiefung des Stoffes besitzen dabei die wöchentlich zu bearbeitenden Übungsaufgaben:</p>

	<ul style="list-style-type: none"> - ein Teil der Aufgaben beschäftigt sich mit einfachen Fragen aus der physikalischen Chemie, die wichtig für den Bereich Molecular Modelling sind. - ein weiterer Teil der Aufgaben dient der Vertiefung des Verständnis der Algorithmen im Bereich der Geometrieoptimierung und dynamischen Simulationen.
Inhalt:	<p>Die thematischen Schwerpunkte der Vorlesung liegen in der Molekülmechanik und Einführung in die Quantenchemie soweit sie die Bioinformatik berühren. Dies umfasst folgende Themengebiete:</p> <ol style="list-style-type: none"> (1) Theorie und Konzeption unterschiedlicher Kraftfeldverfahren. (2) Optimierungsverfahren für molekulare Geometrien. (3) Moleküldynamiksimulationen und ihre Anwendungen auf die Flexibilität und Faltung von Proteinen. (4) Samplingverfahren in Simulationen und konformationeller Raum von Molekülen. (5) Scoringfunktionen für molekulares Docking. (6) Einführung in einfache quantenchemische Verfahren. (7) Aktuelle <i>ab initio</i>, Dichtefunktional und semi-empirische Molekülorbitalmethoden. (8) Solvatationsmodelle zur Beschreibung von Vorgängen in wässriger Lösung. (9) Berechnung, Voraussage und Interpretation von Moleküleigenschaften, Spektren, chemischen Reaktionen und Enzym-Ligand-Bindungsaffinitäten.
Studien- Prüfungsleistungen:	<p>Bearbeitung von etwa 10 Übungsaufgabenblättern, die im wöchentlichen Abstand zur selbständigen Bearbeitung ausgegeben werden. Klausur:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Zulassung bei Erreichen von mindestens 50 % aller Punkte aus den Übungsaufgaben. - Wiederholungsklausur am Ende der vorlesungsfreien Zeit bzw. Anfang des folgenden Semesters
Medienformen:	Die Vorlesung wird als Powerpoint-Vortrag durchgeführt.
Literatur:	<p>Auf der Webseite der Vorlesung (https://www-cbi.cs.uni-saarland.de/teaching/ss-2016/computational-chemistry-ss-2016/) werden die Vortragsfolien bereitgestellt und die Originalarbeiten als vertiefende Lektüre empfohlen. Lehrbücher: A. Leach: „Molecular Modelling“, Prentice Hall, 2001 F. Jensen: „Introduction to Computational Chemistry“, Wiley-VCH, 2006 C.J. Cramer: „Essentials of Computational Chemistry“, Wiley-VCH, 2002</p>