



RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

Fakultät für Chemie

Titel der Lehrinheit (LE)

Modulpraktika Biochemie im Schwerpunkt
Proteine: Struktur und biologische Funktion
Modelling von Proteinen

Bezeichnung der LE

Nr. des
Vorl.-Verzeichnis

LE-Kreditpunkte

4

Fachsemester

7

Dauer :

2 Wochen

SWS

5

Dozenten

J. Schlitter

Prüfer

J. Schlitter, M. Lübben

Studiengänge:

Pflicht-LE für:

M. Sc. in Biochemie

Freiwillige LE für:

M. Sc. in Chemie

Zielsetzungen

Erlernen des Umgangs mit Computermethoden zur Simulation von Proteinen – Struktur und Dynamik

Themenverzeichnis

Molekulare Graphik, Visualisierungsprogramm, Theorie und Praxis der Molekulardynamik-Simulation, Graphik-Animation von Makromolekülen

Lehrmethoden:

Praktikum

2 Wochen ganztägiges Praktikum

Seminar

3 halbe Tage zu Beginn des Praktikums

Überprüfung des Lernfortschritts

Bearbeitung der praktischen Aufgaben und deren Protokollierung, aktive Teilnahme am Seminar

Leistungskontrolle

Regelmäßiger Bericht an Prüfer nach Abschluss von Teilaufgaben, Versuchsprotokoll

Zusammenfassung der Lehrgegenstände

- a. Seminar (theoretische Grundlagen)
- b. Praktikum (Darstellungsverfahren Makromolekülen am Computer; Durchführung von Molekulardynamik-Simulationen)

Im Teil „Modelling“ lernen die Studenten Mittel der Computergrafik und Computersimulation kennen, mit denen sie die Proteine des laborpraktischen Teils, soweit Strukturen vorhanden sind, oder verwandte Proteine weiter untersuchen können. Soweit Kenntnisse noch nicht vorhanden, werden sie eingewiesen in Rasmol, Molmol, Weblab Viewer, Yasara, Whatif und andere einschlägige Programme. Themen sind alle Arten von grafischen Darstellungen, Vermessungen, Vergleiche, Untersuchung auf Strukturprobleme etc. Die Dynamik wird an einem Beispiel mittels MD-Simulation studiert. Zeitverläufe geometrischer und physikalischer Größen werden ermittelt und beurteilt. Für die Präsentation im Seminar wird eine Animation erstellt.

Der Inhalt dieses Forschungspraktikums ist nur exemplarisch; über die tatsächlich durchgeführten Experimente wird kurz vor dem Praktikum entschieden.