

| <b>Strukturelle Bioinformatik</b><br><i>Structural Bioinformatics</i>  |  | Pflichtmodul                  |     |               |     | 6 CP |   |
|--|--|-------------------------------|-----|---------------|-----|------|---|
| Inhalte:   |  |                               |     |               |     |      |   |
| Rechnergestützte Methoden und Anwendungen der Bioinformatik in der Strukturbiologie.   |  |                               |     |               |     |      |   |
| Theorie, Algorithmen und Anwendungen der Moleküldynamiksimulation: Kraftfelder für Moleküldynamiksimulationen von biologischen Makromolekülen (Proteinen, Nukleinsäuren). Behandlung des Lösungsmittels (Wasser). Methoden zur Effizienzsteigerung von Moleküldynamiksimulationen. Simulated Annealing. Anwendung von Moleküldynamiksimulationen in der Proteinstrukturbestimmung, für Ligandendocking und allgemein in der Strukturbiologie.  |  |                               |     |               |     |      |   |
| Proteinstrukturmodellierung und Proteinstrukturvorhersage: Homologiemodellierung, Threading, ab initio Proteinstrukturvorhersage. Algorithmen, Anwendungsbereiche, Voraussetzungen und Grenzen der rechnergestützten Modellierungs- und Vorhersagemethoden. Kritische Evaluation von Proteinstrukturmodellen in Blindversuchen (Critical Assessment of Protein Structure Prediction; CASP).  |  |                               |     |               |     |      |   |
| Qualifikationsziele und Kompetenzen:   |  |                               |     |               |     |      |   |
| <b>VL:</b> Dieses Modul dient der Hinführung der Studentinnen und Studenten zu selbstständiger wissenschaftlicher Arbeit in den an der Goethe-Universität vertretenen Forschungsschwerpunkten im Bereich der Strukturellen Bioinformatik. Das Modul repräsentiert den aktuellen Stand der Forschung in diesem Gebiet. Es wird die Kenntnis der grundlegenden Algorithmen und Methoden der Strukturellen Bioinformatik und die Fähigkeit, diese einzuschätzen und anzuwenden, vermittelt. |  |                               |     |               |     |      |   |
| <b>Ü:</b> Die Übungen vermitteln praktische Erfahrung am Computer mit Moleküldynamiksimulationen bzw. Strukturmodellierung von Proteinen sowie der Analyse von MD Trajektorien und dreidimensionalen Strukturen.   |  |                               |     |               |     |      |   |
| Angebotszyklus :   |  | jährlich im Sommersemester    |     |               |     |      |   |
| Dauer des Moduls:  |  | ein Semester                  |     |               |     |      |   |
| Voraussetzung für die Teilnahme am Modul:  |  | keine                         |     |               |     |      |   |
| (ggf.) Lehr- und Prüfungssprache:  |  | Deutsch / Englisch            |     |               |     |      |   |
| Studiennachweise:  |  | Ü: Teilnahme                  |     |               |     |      |   |
| Modulprüfung sowie Prüfungsform:   |  | VL: Klausur (120-180 Min)     |     |               |     |      |   |
| Voraussetzungen für die Vergabe der CP:  |  | Bestehen der Abschlussprüfung |     |               |     |      |   |
| Herkunft des Moduls sofern nicht aus diesem Studiengang:   |  | Bioinformatik M.Sc.           |     |               |     |      |   |
| Verwendbarkeit des Moduls in anderen Studiengängen:  |  | Bioinformatik M.Sc.           |     |               |     |      |   |
| Lehrveranstaltungen  |  | Typ                           | SWS | Semester / CP |     |      |   |
|  |  |                               |     | 1             | 2   | 3    | 4 |
| Strukturelle Modellierung  |  | VL                            | 3   |               | 4,5 |      |   |
| Übungen zur VL Strukturelle Modellierung   |  | Ü                             | 1   |               | 1,5 |      |   |
| Studentische Arbeitsbelastung (in Zeitstunden):  |  | Kontaktzeit                   |     | Selbststudium |     |      |   |
| Strukturelle Modellierung  |  | 35                            |     | 100           |     |      |   |
| Übungen zur VL Strukturelle Modellierung   |  | 15                            |     | 30            |     |      |   |
| Gesamt   |  |                               |     | 180           |     |      |   |