



FSI3400 Molekylär modellering

7,5 hp

Molecular Modelling

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

Fastställande

Kursplan för FSI3400 gäller från och med VT09

Betygsskala

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Differentialekvationer, fouriertransformer, termodynamik, elektrostatik, elementär kvantmekanik och grundläggande kemi.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Doktoranden ska efter genomgången kurs kunna:

- förklara atomära växelverknings från kvantkemi, och använda kvantkemiska datorprogram.

- behärska molekylmekaniska kraftfält, parametrisering, och deras begränsningar. Man skall vidare kunna genomföra energiminimeringar och molekylodynamiska simuleringar för enkla system.
- kritiskt jämföra metoder och nivåer av modellering för tillämpningar på vatten och proteiner.
- övergripande förstå bioinformatik, kemoinformatik, strukturförutsägelse och proteinveckning.
- redogöra för avancerade modelleringsmetoder som fri-energi och beräkning av lösnings- eller bindingsenergies för små molekyler, dockning, och tillämpningar inom modern läkemedelsdesign.

Kursinnehåll

Kvantkemi: System med en eller flera elektroner. Ab initio-metoder, Hartree-Fock ekvationerna, gaussiska basfunktioner. Orbitaler. Beräkning av partialladdningar och användning av praktiska program.

Molekylära kraftfält: Bindningar, vinklar, torsionsvinklar. Elektrostatik och van der Waals-krafter, parametrisering från experiment eller kvantkemiska beräkningar. Effektiva par-potentialer, vätebindningar. Beräkning av molekylära egenskaper och begränsningar, exempel på kraftfält.

Energilandskap: minimering, algoritmer, normalmodsanalys, övergångstillstånd och reaktionsvägar.

Simuleringsmetoder: Molekylodynamik, ekvibrering, jämvikt, termodynamiska egenskaper från simuleringar, stokastisk dynamik, energikonservering. Monte Carlo-metoder och konformationsanalys.

Bioinformatik: Sekvensanalys, proteinstruktur, homologimodellering, förutsägelse av tredimensionell struktur från sekvens. Kemoinformatik, kombinatoriska databaser.

Avancerade tillämpningar: Beräkning av fri-energi-skillnader i simuleringar, lösningsenergi, kemiska reaktioner, dockning av molekyler, modern läkemedelsdesign med simuleringar och kvantkemi.

Kurslitteratur

Leach, A. R. Molecular modelling - principles and applications, 2nd ed., ISBN 0-582-38210-6

Examination

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

Övriga krav för slutbetyg

Laborationer och skriftlig tentamen.

Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.