SI2710 Molekylär modellering 7,5 hp

Molecular Modelling

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

Fastställande

Kursplan för SI2710 gäller från och med HT07

Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Fysik

Särskild behörighet

Rekommenderade förkunskaper: Differentialekvationer, fouriertransformer, termodynamik, elektrostatik, elementär kvantmekanik och grundläggande kemi.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Kursen ges på avancerad nivå i samarbete mellan Stockholms Universitet och KTH, och är en forskningsnära introduktion till moderna teoretiska metoder inom biofysikalisk kemi. Efter genomgången kurs förväntas studenterna:

- Kunna förklara atomära växelverkningar från kvantkemi, och använda kvantkemiska datorprogram.
- Behärska molekylmekaniska kraftfält, parametrisering, och deras begränsningar. Man skall vidare kunna genomföra energiminimeringar och molekyldynamiska simuleringar för enkla system.
- Kritiskt kunna jämföra metoder och nivåer av modellering för tillämpningar på vatten och proteiner.
- Övergripande förstå bioinformatik, kemoinformatik, strukturförutsägelse och protein-veckning.
- Kunna redogöra för avancerade modelleringsmetoder som fri-energi och beräkning av lösnings- eller bindingsenergier 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 använding av praktiska program.

Molekylära kraftfält: Bindingar, 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: Molekyldynamik, ekvilibrering, 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

- LAB1 - Laborationer, 3,0 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F
- TEN1 - Tentamen, 4,5 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F

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 (LAB1, 3 hp) och skriftlig tentamen (TEN1, 4,5 hp).

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.