

Zeitplan des Moduls „BioSim 2022“

Das Modul findet vom **14.03 bis 29.03.2022** statt.

Die **Vorlesung** findet (sofern in der Tabelle unten nicht anders angegeben) **täglich ab 09:30** (ca. 60-100 min, je nach Vorlesungsinhalt) statt.

Ansprechpartner für die Vorlesung ist Prof. Strodel (b.strodel@fz-juelich.de).

Das Praktikum findet täglich direkt nach der Vorlesung oder ab 09:30 an den Tagen ohne Vorlesung bis ca. 16:00 statt.

Die Teilnahme am Praktikum ist verpflichtend. Es ist ein begleitendes Praktikum, d.h. während des Praktikums bekommen Sie nicht nur Hilfe bei Fragen, sondern auch weitere Informationen. Nur in punktuellen Ausnahmefällen wie Krankheit oder Überschneidung mit einer anderen Uni-Veranstaltung kann das Praktikum für den betroffenen Tag nachgeholt werden. Ansprechpartner für das Praktikum sind:

- Anna Jäckering, a.jaeckering@fz-juelich.de
- Lara Scharbert, l.scharbert@fz-juelich.de
- Moritz Schäffler, mo.schaeffler@fz-juelich.de

Vorlesung und Praktikum finden im Selbstlernzentrum (Raum 26.21.01.04) statt.

Ablaufplan:

Datum	Plan	Betreuung
Mo., 14.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Vorlesung – Einführung Vorlesung – Kraftfeld: Grundlagen Praktikum – Linux Grundlagen & Computercluster JUBIO	Lara, Anna
Di., 15.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Vorlesung – MD-Theorie: Grundlagen Praktikum – 1. Protokoll: VMD Praktikum – MD-Tutorium: Setup und Starten einer MD-Simulation	Moritz, Anna
Mi., 16.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Praktikum – MD-Tutorium: Auswertung	Moritz, Anna
Do., 17.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Vorlesung – Thermostate und Barostate Praktikum – 2. Protokoll: Aufsetzung der MD von Alanin-Dipeptid	Moritz, Lara
Fr., 18.03.2022 9:30 – 15:00	Praktikum – 2. Protokoll: Auswertung der MD von Alanin-Dipeptid	Moritz, Lara
Mo., 21.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Vorlesung – Nichtbindende Kräfte Praktikum – 3. Protokoll: Auswertung der MD von Tpr-Cage-Protein	Moritz (, Anna)
Di., 22.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Vorlesung – „Enhanced Sampling“ MD-Methoden Praktikum 4. Protokoll: Aufsetzung und Auswertung der MD mit implizitem Solvens und REMD von Alanin-Dipeptid	Lara (, Anna)
Mi., 23.03.2022 9:30 – 15:00 Uhr	Praktikum: Umbrella Sampling	Wibke, Lara
Do., 24.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Vorlesung – Geometrie-Optimierung und Monte-Carlo Simulationen Praktikum – 5. Protokoll: GMIN	Anna (, Moritz)

Fr., 25.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Vorlesung – Molekulares Docking Praktikum – Docking-Tutorium	Jennifer (, Lara)
Mo., 28.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Praktikum – Aufsetzen der „Paper“-MD-Simulationen	Lara (, Moritz)
Di., 29.03.2022 9:30 – 16:00 Uhr	Praktikum – Auswertung der „Paper“-MD-Simulationen	Anna (, Lara)

Notenrelevante Leistungen:

1) Protokolle

**Protokolle bis zum Montag, 11. April 2022 per Email an
a.jaeckering@fz-juelich.de**

Zu spätes Einsenden führt zu Punktabzug!

**Bei fehlenden Protokollen und Protokollen mit weniger als 50% der Protokollpunkte bei einem
oder mehr Protokollen erfolgt keine Zulassung zur Klausur!**

Je Protokoll kann 1 Bonuspunkt für die Klausur gesammelt werden, sofern 80% der jeweiligen
möglichen Protokollpunkte erreicht wurden.

2) Seminar:

Jede/r Student/in muss einen 20-30-minütigen Vortrag halten (in 2-er Gruppen), in dem eine
Publikationen vorgestellt wird. Zu dieser Publikation werden am 28.+29.03.22 vergleichende
Simulationen durchgeführt (‐Paper‐-Simulationen), die ebenfalls in dem Vortrag vorgestellt werden
sollen.

Termin: zwischen dem 04.04. und 12.04.2022 (Doodle-Liste folgt)

3) Klausur: zwischen dem 25. und 29.04.2022 (Doodle-Liste folgt)

2) zählt 25% und 3) 75% bei der Gesamtnote.
--