

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) **taglich ab 09:30** (ca. 60-100 min, je nach Vorlesungsinhalt) statt.

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

Das Praktikum findet taglich 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. wahrend des Praktikums bekommen Sie nicht nur Hilfe bei Fragen, sondern auch weitere Informationen. Nur in punktuellen Ausnahmefallen wie Krankheit oder uberschneidung mit einer anderen Uni-Veranstaltung kann das Praktikum fur den betroffenen Tag nachgeholt werden. Ansprechpartner fur das Praktikum sind:

- Anna Jackering, a.jaeckering@fz-juelich.de
- Lara Scharbert, l.scharbert@fz-juelich.de
- Moritz Schaffler, mo.schaffler@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 – Einfuhrung 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 Krafte 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 Publikation 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.
--