



BB2280 Molekylär modellering

7,5 hp

Molecular Modeling

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

Fastställande

Kursplan för BB2280 gäller från och med HT14

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Bioteknik

Särskild behörighet

Minst 150 högskolepoäng från årskurs 1, 2 och 3 varav minst 100 högskolepoäng från årskurs 1 och 2 samt kandidatexamensarbete måste vara avklarade.

I de 150 poängen skall ingå avklarade kurser motsvarande minst 20 hp matematik, numeriska metoder, data, varav minst 5 hp utgörs av numeriska metoder och data, 20 hp kemi där även kurs i kemisk mätteknik kan ingå samt 20 hp bioteknik eller molekylärbiologi

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Datorsimuleringar är idag ett viktigt redskap för studiet av kemiska processer i så vitt skilda system som isolerade molekyler, vätskor, polymerer, fasta tillståndet, samt biologiska makromolekyler, som proteiner och DNA. Den enorma utvecklingen på datorhårdvarusidan innebär att molekylär modellering som fält utvecklas mycket snabbt.

Målet med denna kurs är att ge en överblick över de metoder och tekniker som används inom modern molekylär modellering. Grundläggande teori kommer att behandlas och tillämpningar inom kemi, biokemi och läkemedelskemi kommer att beröras.

Kursinnehåll

Kursen består av både föreläsningar och praktiska datorövningar. Följande ämnen kommer att behandlas:

- Grundläggande kvantkemi. Molekylorbitalteori, semiempiriska metoder
- Grundläggande täthetsfunktionalsteori (DFT)
- Molekylmekanik och molekuldynamik
- Monte Carlo metoder
- Energiminimering och potentialytor
- QM/MM metoder
- Solvatisering och omgivningseffekter
- Teoretiska metoder inom läkemedelskemi: dockning, proteinstruktur prediktion, QSAR
- Simulering av kemiska reaktioner i lösningar
- Modellering av enzymatisk katalys
- Studiebesök på ett läkemedelsföretag

Kurslitteratur

Andrew R. Leach: Molecular Modelling, Principles and Applications, 2ed, samt utdelat material.

Examination

- LAB1 - Laborationer, 1,5 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F
- TEN1 - Skriftlig tentamen, 6,0 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

Tentamen (TEN1, 6,0 hp, betygsskala A – F) och godkänd laborationskurs (LAB1, 1,5 hp, betygsskala A - F).

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.