



# INSTITUTIONEN FÖR KEMI OCH MOLEKYLÄRBIOLOGI

## **KEM552 Grundläggande molekylmodellering, 5 högskolepoäng**

Introduction to molecular modelling, 5 credits

*Avancerad nivå / Second Cycle*

---

### **Fastställande**

Kursplanen är fastställd av Institutionen för kemi och molekylärbiologi 2013-07-05 och senast reviderad 2018-09-04. Den reviderade kursplanen gäller från och med 2018-09-04, höstterminen 2018.

*Utbildningsområde:* Naturvetenskapligt 100 %

*Ansvarig institution:* Institutionen för kemi och molekylärbiologi

### **Inplacering**

Kursen är inplacerad på nivån 90-120 högskolepoäng för kandidatexamen. Den räknas som kurs på avancerad nivå för masterexamen och kan även läsas som fristående kurs. Kursen ersätter de tidigare kurserna KEM551 och KEN550 och kan inte tillgodoräknas tillsammans med någon av dem i samma examen.

Kursen kan ingå i följande program: 1) Organisk kemi och läkemedelskemi, masterprogram (N2KEL), 2) Kemi och lärande, masterprogram (N2KOL), 3) Läkemedelskemi, kandidatprogram (N1LMK), 4) Kemi, masterprogram (N2KEM) och 5) Kemi, kandidatprogram (N1KEM)

### *Huvudområde*

Kemi med inriktning mot läkemedelskemi

Kemi

### *Fördjupning*

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

### **Förkunskapskrav**

För tillträde till kursen krävs avslutade och godkända kurser inom det naturvetenskapliga fältet om 90 hp (eller 120 hp inom farmaci/medicin). Genomgången kurs KEM040, Fysikalisk kemi (15 hp), alternativt FYP203, Kvantfysik A (7,5 hp) eller

motsvarande kunskaper, samt kunskaper motsvarande minst kurs MMGK11, Naturvetarmatematik A1 (15 hp) rekommenderas.

### Lärandemål

Efter avslutad kurs förväntas studenten kunna:

#### *Kunskap och förståelse*

- **redovisa** molekylmodelleringens grundläggande idéer och dess betydelse för att lösa kemiska problem, **beskriva** tillämpningar av molekylmekaniken i olika fält av kemin,
- **förklara** idén bakom molekylmekaniken och uppbyggnaden av ett kraftfält, **nämna** de olika typer av kraftfält och **förklara** innebörden och strukturen av termerna i ett kraftfält,
- **nämna** några viktiga tillgängliga kraftfält, deras egenskaper och tillämpningsområden,
- **beskriva** olika metoder att finna ett systems jämviktsgeometrier,
- **förklara** principen bakom molekylodynamiken (MD) och Monte-Carlo (MC)-metoden samt tillämpningsområdena för dessa metoder.

#### *Färdigheter och förmåga*

- **bygga** molekylmodeller med programpaketen Molecular Operating Environment och Chimera,
- **sätta upp och genomföra** energiminimeringar,
- **sätta upp, genomföra och utvärdera** enklare docknings-protokoll,
- **sätta upp** MC- och MD-beräkningar på ett lämpligt sätt och **analysera** resultat från dessa beräkningar,
- **använda** visualiseringsmetoder effektivt.

#### *Värderingsförmåga och förhållningssätt*

- **uppskatta** kvalitén och pålitligheten av beräkningsresultaten och **värdera** i vilka fall molekylmekaniken är tillräcklig.

### Innehåll

Kursen beskriver molekylmodelleringen med fokus på molekylmekaniken, som är den lämpliga metoden för att studera stora system (tex proteiner eller DNA-molekyler) under realistiska förhållanden (vattenlösning, ändlig temperatur). Följande ämnen kommer att behandlas:

1. Molekylmodelleringens syfte och problemställningar. Jämviktsstrukturer, potentialytor, fria energier

2. Molekylmodelleringens standardverktyg: Molekylmekanik, kraftfält, typer av kraftfält
3. Att hitta jämviktsstrukturer: Geometrioptimering
4. Simuleringar under reella villkor: Molekyldynamik (MD) och Monte-Carlo (MC)-metoden
5. Konformationssökning
6. Visualisering och molekylära egenskaper
7. Tillämpningar av molekylmodellering: Simulering av stora molekyler, ligand-receptor-dockning, farmakoformodellering
8. Trender i molekylmodelleringen: Polariserbara kraftfält, kraftfält för kemiska reaktioner, QM/MM,...

Lektionerna ledsagas av datalaborationer där viktiga moment av teorin demonstreras och tränas baserat på moderna programpaket. Den avslutande delen av kursen inkluderar ett kortare datorprojekt som studenten genomför, sammanfattar i en rapport samt presenterar för klassen.

Kursen indelas i två delmoment. Delmoment A (3,0 hp) omfattar teorin enligt ovan, delmoment B (2,0 hp) omfattar laborationerna.

#### *Delkurser*

1. **Teoridelen** (*Theory part*), 3 hp  
Betygsskala: Väl godkänd (VG), Godkänd (G) och Underkänd (U)
2. **Datalaborationer** (*Computer exercises*), 2 hp  
Betygsskala: Godkänd (G) och Underkänd (U)

#### **Former för undervisning**

**Delkurs 1:** Undervisning sker i form av föreläsningar samt ett projektarbete.

**Delkurs 2:** Undervisning sker i form av datalaborationer inkluderande redovisningar.

*Undervisningsspråk:* engelska och svenska

Kursen ges som huvudregel på svenska men kan ges helt eller delvis på engelska om omständigheterna påkallar det.

#### **Former för bedömning**

**Delkurs 1:** Kunskapskontroll sker genom utförande och redovisning av projektarbete.

**Delkurs 2:** Kunskapskontroll sker baserat på aktivt deltagande i laborationerna och redovisningarna.

Om student som underkänts två gånger på samma examinerande moment önskar byte av examinator inför nästa examinationstillfälle, ska sådan begäran inlämnas skriftligt till kursansvarig institution och bifallas om det inte finns särskilda skäl däremot (HF 6 kap § 22).

I det fall en kurs har upphört eller genomgått större förändringar ska studenten i normalfallet garanteras tillgång till minst tre provtillfällen (inklusive ordinarie provtillfälle) under en tid av åtminstone ett år med utgångspunkt i kursens tidigare uppläggning.

### **Betyg**

På kursen ges något av betygen Väl godkänd (VG), Godkänd (G) och Underkänd (U).

**Delkurs 1:** Betyg VG, G eller U meddelas.

**Delkurs 2:** Betyg G eller U meddelas.

**Slutbetyg:** För betyg G på hela kursen krävs betyg G på delkurs 1 och G på delkurs 2.

För betyg VG på hela kursen krävs betyg VG på delkurs 1 och G på delkurs 2.

Angående tillämpning av ECTS-skalan för betyg var god se Rektors beslut 2007-05-28, dnr G 8 1976/07.

### **Kursvärdering**

Kursvärdering görs i relation till kursens lärandemål och innehåll och genomförs i slutet av kursen genom en individuell skriftlig enkät på Göteborgs universitets lärplattform. Student som deltar i eller har avslutat en kurs ska ges möjlighet att anonymt framföra erfarenheter av och synpunkter på kursen i en kursvärdering. En sammanställning av kursvärderingen och kursansvarig lärarens reflektion ska tillgängliggöras för studenterna inom rimlig tid efter kursslut.