

# Biomoleküle: Datenbanken, Visualisierungen und Rechnungen



Multimediazentrum MMZ-2, Raum 1225/1227, Mi. 16:15 – 18:00

[http://www.ipht-jena.de/BEREICH\\_3/lectures/biovis.html](http://www.ipht-jena.de/BEREICH_3/lectures/biovis.html)

**ACHTUNG: BEGINN AM 24.10.2007, aus organisatorischen Gründen wird dringend um Anwesenheit in der ersten Stunde gebeten !**

**Dr. Peter Schellenberg, IPHT-Jena, tel. 03641/206308**  
[peter.schellenberg@ipht-jena.de](mailto:peter.schellenberg@ipht-jena.de)

Die Lehrveranstaltung gibt eine Einführung in die Strukturvisualisierung von Biomolekülen am Computer (Stichwort: PDB-viewer), sowie die Nutzung von Internetressourcen für die Biochemie und Biophysik. Dabei werden Proteinvisualisierungsprogramme, Programme zur Molekularen Dynamik, zum Docking und zu Rechnungen und Visualisierungen kleiner Moleküle behandelt. Jedem Studenten steht ein Rechner mit den installierten Programmen zur Verfügung, bei denen es sich ausnahmslos um Freewareprogramme handelt. So können die Teilnehmer die erlernten Techniken auch auf dem eigenen Rechner nutzen. Nach gemeinsamer Einführung in den jeweiligen Themenkomplex (ca. 1.5 h) steht Zeit zur freien Übung zur Verfügung.

24.10.07	Vorbesprechung, Einführung in die Protein Data Bank und das PDB -Format, Darstellung von Proteinen, weitere Internetressourcen, Protein Viewer Browser Plug-ins : Chime, Jmol etc
31.10.07	Keine Lehrveranstaltung -Reformationstag
07.11.07	Einführung und praktische Beispiele am PDB-viewer Rasmol und VMD
14.11.07	Weiterführende Möglichkeiten der Biomoleküldarstellung mit VMD
21.11.07	Erweiterungen von VMD, Strukturalignment, Ramachandranplot, Sequence Viewer etc.,
28.11.07	Scriptprogrammierung von VMD mit TCL/TK, Besprechung freiwillige Homework-Assignments
05.12.07	Molecular Dynamics Simulationen mit NAMD / VMD und kurze Einführung in die Theorie
12.12.07	Vorstellung der Jena Library of Biological Macromolecules (Gast: Dr. Sühnel, FLI Jena)
19.12.07	Docking und Alignment Programme HEX 4.5 Darstellungen von Interaktionsoberflächen mit VMD / Intersurf
09.01.08	Evolution biomolekularer Strukturen mit VMD / Multiseq
16.01.08	Einführung in Rechnungen und Visualisierungen kleiner Moleküle (Orbitale, Übergangszustände, Schwingungen)
23.01.08	Vorstellung selbstentwickelter Representationen und Skripte durch die Teilnehmer