

## KURSPROGRAMM

### MONTAG, 11. MÄRZ 2013

- » Klassifizierung und Eigenschaften von Aminosäuren, 2D/3D-Struktur von Proteinen, Sequenzdatenbanken und Suchsysteme
- » Sekundärstrukturvorhersage, Sequenzeigenschaften und -alignment
- » *Mittagspause*
- » Anwendung webbasierter Sequenzanalysetools, Durchführung multipler Alignments
- » Aufbau und Visualisierung von Peptiden

### DIENSTAG, 12. MÄRZ 2013

- » Kraftfeldverfahren, Geometrieoptimierung, Konformationsanalyse und Moleküldynamik
- » Setup, Durchführung und Auswertung von Kraftfeldrechnungen
- » *Mittagspause*
- » Setup, Durchführung und Auswertung von Moleküldynamik-Simulationen
- » Durchführung und Auswertung von MD-Simulationen, Einfluss von Lösungsmittelmodellen

### MITTWOCH, 13. MÄRZ 2013

- » Visualisierung von Proteinen und deren Eigenschaften
- » Manipulation von Proteinstrukturen
- » *Mittagspause*
- » Manipulation von Proteinstrukturen
- » Grundlagen der Homologiemodellierung von Proteinen

### DONNERSTAG, 14. MÄRZ 2013

- » Homologiemodellierung in der Praxis
- » Optimierung von Homologiemodellen: der Einfluss des Alignments auf die Struktur
- » *Mittagspause*
- » Optimierung von Homologiemodellen: Refinement und alternative Template
- » Software und Literaturübersicht

Die *Sessions* gliedern sich in einen theoretischen und einen praktischen Teil, wobei grundlegende Techniken zunächst *Hands-on* vorgeführt und danach selbständig angewandt werden können. Für jeden Teilnehmer steht ein eigener Arbeitsplatz zur Verfügung.

(Änderungen vorbehalten)

## HINWEISE FÜR TEILNEHMER

### VERANSTALTUNGSORT

Der Kurs findet am Computer-Chemie-Centrum der Universität Erlangen-Nürnberg, Nögelsbachstraße 25, 91052 Erlangen, statt.

### KURSABLAUF

Beginn: Montag, 11.03.2013, 09:00 Uhr

Ende: Donnerstag, 14.03.2013, 16:00 Uhr

Es besteht die Möglichkeit zum Mittagessen in nahegelegenen Restaurants und Cafes.

### ANMELDUNG

Sie können sich online, mit dem Anmeldeformular oder formlos per E-Mail anmelden:

DECHEMA-Forschungsinstitut  
Weiterbildung  
Postfach 170352  
D-60077 Frankfurt am Main

Tel.: +49 69 7564-253/202  
Fax: +49 69 7564-414  
E-Mail: [gruss@dechema.de](mailto:gruss@dechema.de)  
E-Mail: [weber-heun@dechema.de](mailto:weber-heun@dechema.de)  
Internet: <http://dechema-dfi.de/kurse>

Aufgrund der umfangreichen Vorbereitungen ist eine Anmeldung bis spätestens 18. Februar 2013 erwünscht.

Die Weiterbildungskurse werden vom DECHEMA-Forschungsinstitut, eine Stiftung bürgerlichen Rechts, in Kooperation mit der DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. angeboten.

### KURSGEBÜHR

1.005,- €

990,- € (persönliche DECHEMA-Mitglieder)

(inkl. Kursunterlagen und Pausengetränken)

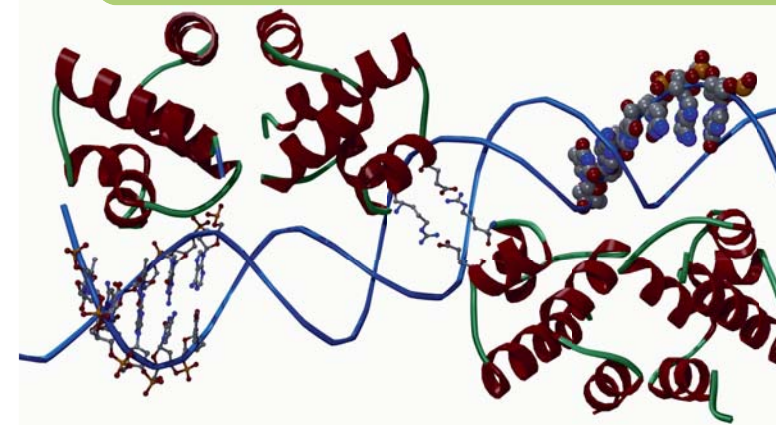
Die Teilnehmerzahl ist begrenzt.

## WEITERBILDUNGSKURS

11. - 14. März 2013  
Erlangen

# Protein Modellierung

- von der Sequenz zur Struktur



## MODELLIERUNG VON PROTEINSTRUKTUREN

Im Hinblick auf steigende Kosten sowie experimentellen Aufwand gewinnt der Einsatz theoretischer Verfahren besonders in der pharmazeutischen und medizinisch-technischen Chemie zunehmend an Bedeutung. Aufgrund der Fülle der mittlerweile zur Verfügung stehenden Software für die verschiedensten Einsatzgebiete ist eine Spezialisierung auf Teilbereiche fast unumgänglich. Dabei kann zwischen makroskopischen Systemen (z.B. Proteine oder DNS) sowie kleinen Molekülen (organische und anorganische Verbindungen) unterschieden werden.

Den Teilnehmern dieses Kurses wird ein Überblick über aktuell in der Forschung verwendete theoretische Konzepte und Lösungsoptionen zur Beschreibung biologischer Makromoleküle gegeben. Dabei wird der Schwerpunkt auf die Behandlung von Proteinstrukturen gelegt. Ausgehend von einer gegebenen Aminosäuresequenz für ein Peptid oder Protein sollen Informationen über familiäre Zusammenhänge, mögliche Sekundärstrukturen bis hin zur dreidimensionalen Geometrie analysiert oder neu berechnet werden. Hierfür werden Methoden des Auffindens und Vergleichens homologer Sequenzabschnitte, des Sequenzalignments und der Strukturmodellierung auf Grundlage bekannter Geometrien homologer Systeme vorgestellt und diskutiert. Speziell für Proteine wird auf Verfahren wie Geometrieoptimierungen sowie zeitabhängige Untersuchungen via Moleküldynamik-Simulationen und deren Analysemöglichkeiten eingegangen. Besonderer Wert wird auf die Visualisierung von Proteinstrukturen und deren Eigenschaften gelegt. Der Einfluss des Alignments auf die resultierenden Strukturmodelle wird an praktischen Beispielen demonstriert.

## LERNZIEL

Nach Abschluss des Kurses sollen die Teilnehmer in der Lage sein

- » sich Informationen rund um eine gegebene Aminosäuresequenz aus dem Internet beschaffen zu können
- » eine Sequenz auf ihre physikalisch-chemischen Eigenschaften sowie Sekundärstrukturtendenzen hin zu analysieren
- » die dreidimensionale Struktur eines Peptids oder Proteins durch Homologie-Modellierung zu erstellen
- » Proteinstrukturen gezielt durch Mutationen, Insertionen bzw. Deletionen zu manipulieren
- » die erstellten Geometrien durch Optimierung und Moleküldynamik-Simulationen auf ihre Eigenschaften hin untersuchen zu können
- » ein Strukturmodell durch Modifikation des zugrunde liegenden Sequenzalignments kontrolliert zu manipulieren
- » das erworbene Wissen selbständig und gezielt zu erweitern sowie auf eigene Fragestellungen anzuwenden.

## STOFFVERMITTLUNG

Der Stoff wird in Vorträgen mit der Möglichkeit zur Diskussion vermittelt. Es werden praktische Übungen an persönlichen Arbeitsplatzrechnern durchgeführt, wobei die Teilnehmer die vorgestellten Methoden und ausgewählte Programme zunächst unter Anleitung anwenden und dann, falls gewünscht, einfache Aufgaben selbständig lösen.

## ZIELGRUPPE

Naturwissenschaftler, Chemiker, Biologen, Mediziner, Biotechnologen und Pharmazeuten in Forschung und Entwicklung.

Abgesehen von Computergrundlagen und elementarsten Grundlagen über biologische Makromoleküle sind keine besonderen Vorkenntnisse erforderlich.

## KURSUNTERLAGEN

Jeder Kursteilnehmer erhält zu Beginn der Veranstaltung einen Ordner mit den Folien der Vorträge sowie zusätzlichen Materialien zu den Demonstrationen und Übungsaufgaben.

## KURSLEITUNG

PD Dr. Harald Lanig  
 Computer-Chemie-Centrum  
 Universität Erlangen-Nürnberg  
 E-Mail: harald.lanig@chemie.uni-erlangen.de

## VORTRAGENDE

PD Dr. Harald Lanig

N. N.

## RAHMENPROGRAMM

Am Montag gemeinsames Abendessen in einer fränkischen Gaststätte, zu dem die Teilnehmer eingeladen sind.

I

**Brief-/Fax-Antwort**  
**(Fax-Nr.: +49 69 7564-414)**

**DECHEMA-Forschungsinstitut**  
Weiterbildung  
Postfach 17 03 52  
D-60077 Frankfurt am Main

**Anmeldung** für den DECHEMA-Kurs 3154 vom 11. – 14.03.2013

**PM**

**“Protein Modellierung - von der Sequenz zur Struktur”** in Erlangen

Anmeldeschluss: 18.02.2013

Die Anmeldungen werden entsprechend der Reihenfolge des Eingangs berücksichtigt.

---

**Veranstaltungsteilnehmer**

Frau  Herr  Titel \_\_\_\_\_

Name \_\_\_\_\_

Vorname \_\_\_\_\_

Firma \_\_\_\_\_

Abteilung \_\_\_\_\_

Straße/Postfach \_\_\_\_\_

PLZ/Ort \_\_\_\_\_

Telefon/Fax \_\_\_\_\_ E-Mail \_\_\_\_\_

**Abweichende Rechnungsanschrift**

Firma \_\_\_\_\_

Abteilung \_\_\_\_\_

Straße/Postfach \_\_\_\_\_

PLZ/Ort \_\_\_\_\_

Ich bin persönliches DECHEMA-Mitglied:  ja  nein

Die Kursgebühr beträgt 1.005,- € / 990,- € (persönliche DECHEMA-Mitglieder). Erst nach Zusendung der Rechnung durch die DECHEMA (ca. 3 - 4 Wochen vor Kursbeginn) bitten wir um Überweisung. Wird eine Anmeldung mindestens zwei Wochen vor Kursbeginn storniert, erfolgt Erstattung der Teilnehmergebühr abzüglich 10 % für Verwaltungskosten. Bei Stornierung zu einem späteren Termin ist eine Erstattung nicht mehr möglich. Unsere auf Kostendeckung kalkulierten Teilnehmergebühren unterliegen nicht der Mehrwertsteuerpflicht (Steuerbefreiung nach § 4.22 UStG).

Mit der Anmeldung akzeptieren Sie unsere allgemeinen Geschäftsbedingungen. Diese finden Sie im Internet unter [http://dechema-dfi.de/agb\\_kurse](http://dechema-dfi.de/agb_kurse) oder Sie können sie beim Weiterbildungssekretariat der DECHEMA anfordern.

\_\_\_\_\_  
Ort, Datum

\_\_\_\_\_  
Unterschrift und Firmenstempel