

ประมวลรายวิชา (Course Syllabus)

1. รหัสวิชา 2302667
2. จำนวนหน่วยกิต 2
3. ชื่อวิชา (Course Title) เรื่องคัดเฉพาะทางเคมีฟิสิกัล 3
(Selected Topics in Physical Chemistry III)
Molecular modeling and simulation techniques of
Biological nanomolecules
4. คณะ/ภาควิชา ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์
5. ภาควิชาการศึกษา ปลาย
6. ปีการศึกษา 2554
7. ชื่อผู้สอน รศ. ดร.พรเทพ สมพรพิสุทธิ์
8. เงื่อนไขรายวิชา
 - 8.1 วิชาที่ต้องเรียนมาก่อน ไม่มี
 - 8.2 วิชาบังคับร่วม ไม่มี
 - 8.3 วิชาควบ ไม่มี
9. สถานภาพของวิชา วิชาเลือก
10. ชื่อหลักสูตร วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิตและดุษฎีบัณฑิต
11. วิชาระดับ ปริญญาโท/ปริญญาเอก
12. จำนวนชั่วโมงที่สอน/สัปดาห์ 2
13. เนื้อหารายวิชา (Course Description) ตามที่ปรากฏในหลักสูตร
14. ประมวลการเรียนรายวิชา
 - 14.1 วัตถุประสงค์ทั่วไปและ/หรือวัตถุประสงค์เชิงพฤติกรรม
 - สามารถใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์เป็นเครื่องมือในการวิเคราะห์ ตรวจสอบ คำนวณและศึกษาโครงสร้างของชีวโมเลกุลระดับนาโนเมตรได้
 - สามารถระบุรายละเอียดจากข้อมูลโครงสร้างสามมิติของชีวโมเลกุล ซึ่งได้แก่ ชนิดและประเภทของธาตุและของกรดอะมิโน พันธะเพปไทด์ การยึดจับ เป็นต้น
 - สามารถสร้าง จำลองทางพลวัต และวิเคราะห์ระบบชีวโมเลกุลระดับนาโนเมตร
 - 14.2 เนื้อหารายวิชาต่อสัปดาห์

สัปดาห์	หัวข้อ	เนื้อหารายวิชา
---------	--------	----------------

1	Introduction-1	- Biomolecular modeling, coordinate systems, software, database, introduction to UNIX - Workshop: Basic UNIX commands
2	Introduction-2	- Molecular graphic representations, computing resources, hardware, units, molecular modeling literature, some mathematical concepts - Workshop: Visualizing biomolecules with VMD or molecule modeling software (Installation, loading a molecule, displaying the protein, exploring different representation, coloring, selection, multiple representation, sequence extension etc.)
3	Structure, properties & interactions-1	- Fundamental principles of proteins, amino acids, peptides; structure, composition, conventional nomenclature, stereochemistry, classification, ionization, levels of structures, protein data bank, pdb format, three-dimension structure of proteins, protein structure determination - Workshop: Protein Data Bank and protein structure file formats (searching a protein, downloading protein structure, analyzing structural data)
4	Structure, properties & interactions-2	- Bond lengths, bond angles, torsion angles, peptide bonds, α -C chirality, secondary structure elements, hydrophobicity, hydrogen bonding, ionization state, molecular surface, solvent accessible surface areas, protein-drug interactions, binding site - Workshop: Analyzing structure, properties and interactions from 3D structure data (VMD)
5	Modeling & simulation-1	- Molecular mechanic potential functions, force field parameters, bonded and non-bonded interactions, atom type, atom name, partial atomic charges, Lennard-Jones potentials, electrostatic interaction - Workshop: Building molecular topology and computing molecule mechanic energy of biomolecule
6	Modeling & simulation-2	- Molecular dynamics (MD) technique I: energy minimization, force, the equation of motion, integration algorithm, periodic boundary condition, Ewald summation, solvent model, time step, time scale - Workshop: Preparing MD systems (NAMD, Amber or CHARMM)
7	Modeling & simulation-3	- Performing the simulation and preliminary analysis - Workshop: making images and movies
8	Modeling & simulation-4	- Trajectory analysis I : RMSD and RMSF
9	Modeling & simulation-5	- Trajectory analysis II : hydrogen bonding and secondary structure plot
10	Modeling & simulation-6	- Trajectory analysis III : RDF
11	Modeling & simulation-7	- Free versus restraint MD
12	Modeling &	- Comparative modeling

