

Molecular Modelling		Wahlpflichtmodul		4 CP		
Inhalte: chemische und physikalische Prozesse der biologischen Wirkung; Wirkstoffdesign; Protein/Ligand-Wechselwirkungen; Leitstruktursuche und -optimierung; Methoden zur experimentellen Bestimmung und Berechnung von Molekülstrukturen; Proteinmodellierung; quantitative Struktur/Wirkungs-Beziehungen; strukturbasiertes Wirkstoffdesign (Methoden und Beispiele)						
Qualifikationsziele und Kompetenzen: Die Studierenden erhalten einen Überblick über die verschiedenen Konzepte bei der Wirkstoffentwicklung. Sie verstehen die prinzipielle Vorgehensweise beim Molecular Modelling und erkennen die herausragende Bedeutung der dreidimensionalen Strukturen von Wirkstoffen, Proteinen und Wirkstoff/Rezeptor-Komplexen für ein rationales Wirkstoffdesign. Durch die Beschäftigung mit Erfolgen, aber auch mit Fehlschlägen erwerben sie eine kompetente und kritische Sicht der Möglichkeiten und Grenzen des Molecular Modelling.						
Angebotszyklus:		einmal pro Jahr (im Wintersemester)				
Dauer des Moduls:		1 Semester				
Voraussetzung für die Teilnahme am Modul:		keine				
Organisatorisches:		Eine intensive Vorbereitung mit ergänzendem Literaturstudium wird erwartet.				
Studiennachweise (Teilnahme- / Leistungsnachweise):		regelmäßige Teilnahme				
Modulabschlussprüfung / Prüfungsform:		Referat				
Voraussetzung für die Vergabe der CP:		bestandene Modulabschlussprüfung				
Verwendbarkeit des Moduls in anderen Studiengängen:		Wahlpflichtmodul für Studierende des Masterstudiengangs Bioinformatik				
Lehrveranstaltungen	Typ	SW S	Semester / CP			
			1	2	3	4
Molecular Modelling	S	2	4			