

[CW-N.7] Molecular Modelling	Molecular Modelling	Wahlpflichtmodul	4 CP (insg.) = 120 h				2 SWS
			Kontaktstudium 2 SWS / 30 h	Selbststudium 90 h			
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)							
Lernergebnisse / Kompetenzziele							
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.							
Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls							
Keine							
Empfohlene Voraussetzungen							
Keine							
Organisatorisches							
Die Modulprüfung besteht aus einer Präsentation über eine wissenschaftliche Veröffentlichung zum entsprechenden Seminarthema. Dem Vortragenden wird zwei Wochen vor dem Präsentationstermin vom DozentInnen eine aktuelle wissenschaftliche Veröffentlichung ausgehändigt. Benotet wird, ob das Thema fachlich korrekt abgehandelt wurde, alle in der Veröffentlichung enthaltenen Aspekte des Molecular Modelling herausgearbeitet wurden, die Sachverhalte verständlich präsentiert wurden, in der Diskussion überzeugend argumentiert wurde, Fragen aus dem Publikum beantwortet werden konnten und die zeitlichen Vorgaben eingehalten wurden.							
Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)		M.Sc. Chemie / FB14					
Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge		M.Sc. Bioinformatik / FB12/15					
Häufigkeit des Angebots		Einmal im Jahr (im Wintersemester)					
Dauer des Moduls		1 Semester					
Modulbeauftragte / Modulbeauftragter		Apl.-Prof. W. Schubert					
Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen							
Teilnahmenachweise		Regelmäßige und aktive Teilnahme					
Leistungsnachweise		Keine					
Lehr- / Lernformen		Seminar					
Unterrichts- / Prüfungssprache		Deutsch					
Modulprüfung		Form / Dauer / ggf. Inhalt					
Modulabschlussprüfung bestehend aus:		Präsentation (30 Min.)					
kumulative Modulprüfung bestehend aus:							
Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:							
		LV-Form	SWS	Semester CP			
				1	2	3	4
	Molecular Modelling	S	2	4		4	
	SUMME		2	4			