

Modultitel	Angewandte Chemieinformatik und Wirkstoffentwurf				
Modulnummer/-kürzel	MBI-ACW				
Verwendbarkeit	M.Sc. Chemie: Wahlpflichtmodul M.Sc. Lebensmittelchemie: Wahlpflichtmodul M.Sc. Molecular Life Sciences: Wahlpflichtmodul Promotionsstudium Chemie				
Voraussetzungen für die Teilnahme	Verbindlich: keine Empfohlen: Kenntnisse der Biochemie				
Modulverantwortliche(r)	Dr. Katrin Schöning-Stierand				
Sprache	Deutsch oder Englisch i.d.R. Deutsch				
Qualifikationsziele	Die Studierenden haben Kenntnisse des computergestützten Wirkstoffentwurfs. Sie haben einen Überblick über relevante Datenbanken und können die Qualität biologischer und chemischer Daten beurteilen. Sie sind in der Lage, neue Wirkstoffkandidaten für relevante Zielproteine mittels liganden- und strukturbasierter Methoden abzuleiten und deren physikochemischen Eigenschaften abzuschätzen.				
Inhalt	In diesem Modul werden Kenntnisse über angewandten, computergestützten Wirkstoffentwurf vermittelt. Es werden insbesondere die folgenden Themen besprochen: <ul style="list-style-type: none"> • Medizinalchemische Grundlagen und Strategien des Wirkstoffentwurfs, der Leitstrukturidentifizierung und Leitstrukturoptimierung • Gebräuchliche Datenformate und Datenbanken • Liganden- und strukturbasierte Ansätze des computergestützten Wirkstoffdesigns • Softwarepakete für angewandte Chemieinformatik und Wirkstoffentwurf • Visuelle Programmierung zur Automatisierung von Arbeitsabläufen 				
Lehrveranstaltungen und Lehrformen	Angewandte Chemieinformatik und Wirkstoffentwurf (V)			2 SWS	
	Angewandte Chemieinformatik und Wirkstoffentwurf (Ü)			2 SWS	
Arbeitsaufwand (Teilleistungen und insgesamt)		LP	P (Std)	S (Std)	PV (Std)
	Ang. Chemieinformatik und Wirkst.	3	28	42	20
	Ang. Chemieinformatik und Wirkst.	3	28	42	20
	Gesamtaufwand	6	56	84	40
Voraussetzungen für Teilnahme an und Art der Studien- und Prüfungsleistungen	Voraussetzungen zur Modulprüfung: keine Art der Modulprüfung: Mündliche Prüfung (benotet) Prüfungssprache: i.d.R. Deutsch				
Dauer	1 Semester				
Häufigkeit des Angebots	In der Regel im Sommersemester				
Literatur					