

Importmodul:

[FW-N.4] <i>Computational Drug Design</i>	Computerorientierte Medikamentenentwicklung	Wahlpflichtmodul	5 CP (insg.) = 150 h				4 SWS
			Kontaktstudium 4 SWS / 60 h	Selbststudium 90 h			
Inhalte							
<p><u>Lecture</u>: The theory and application of computational methods used in drug design and discovery are presented in an application-oriented way. For this purpose, different computational methods, such as docking, modeling, ligand-based approaches, bioinformatic approaches as well as molecular dynamics (MD) simulation-based methods, are introduced. Their applications in drug design will be discussed with numerous examples from published scientific literature. Furthermore, for each method the widely used softwares will be introduced and exercises utilising these software are integrated into the lectures.</p> <p><u>Practical course</u>: During the practical part, the individual methods are applied to simple problems of drug design. The topics offer a wide variety of computational methods spanning theoretical biophysics, biochemistry, and medicinal chemistry.</p>							
Lernergebnisse / Kompetenzziele							
The goal of this module is to introduce the students to the modern computational tools widely used for drug design. Students understand the theory, application, and limitations of each method and would be able to use them for specific projects. Through the focus on sample programs, students learn how to use computational methods in different projects.							
Teilnahmevoraussetzungen für Modul bzw. für einzelne Lehrveranstaltungen des Moduls							
Keine							
Empfohlene Voraussetzungen							
Basic knowledge of programming and Linux environment, bachelor-level knowledge of organic chemistry as well as good knowledge of protein chemistry and structure. Use your own laptop during the lecture.							
Organisatorisches							
Importmodul, es gelten die Anmelde- und Rücktrittsfristen der Ordnung des Masters Biophysik. (Die Prüfung erfordert eine online Anmeldung, spätestens sieben Tage vor dem Prüfungstermin. Bis ein Werktag vor dem Prüfungstermin ist der Rücktritt ohne Angabe von Gründen möglich.)							
Zuordnung des Moduls (Studiengang / Fachbereich)		Master Biophysik / FB13					
Verwendbarkeit des Moduls für andere Studiengänge		Master Biochemie / FB14					
Häufigkeit des Angebots		Wintersemester					
Dauer des Moduls		1 Semester					
Modulbeauftragte / Modulbeauftragter		Prof. Hummer					
Studiennachweise/ ggf. als Prüfungsvorleistungen		Keine					
Teilnahmenachweise		Keine					
Leistungsnachweise		Keine					
Lehr- / Lernformen		Vorlesung, Praktikum					
Unterrichts- / Prüfungssprache		Englisch					
Modulprüfung		Form / Dauer / ggf. Inhalt					
Modulabschlussprüfung bestehend aus:		Schriftliche (Klausur 90 Min.) oder mündliche (30 Min.) Abschlussprüfung zur Vorlesung					
kumulative Modulprüfung bestehend aus:							
Bildung der Modulnote bei kumulativen Modulprüfungen:							
		LV-Form	SWS	Semester CP			
				1	2	3	4
	Computational Drug Design	V	2	3		3	
	Computational Drug Design	P	2	2		2	
	SUMME		4	5			