

Modultitel	Angewandtes, computerunterstütztes Wirkstoffdesign (Applied computer-aided molecular design)				
Modulnummer/-kürzel	MBI-18-3				
Semester	Sommersemester				
Verwendbarkeit, Modultyp und Zuordnung zum Curriculum	Wahlpflichtmodul				
Voraussetzungen für die Teilnahme	Empfohlen: keine Verbindlich: keine				
Modulverantwortliche(r)	Johannes Kirchmair				
Lehrende	Mitglieder des Lehrkörpers Zentrum für Bioinformatik				
Sprache	Deutsch mit deutsch- und gegebenenfalls englischsprachigem Lehrmaterial oder Englisch mit englischsprachigem Lehrmaterial				
Angestrebte Lernergebnisse	Die Studierenden verfügen über ein prinzipielles Verständnis für computerunterstütztes Wirkstoffdesign, haben einen Überblick über relevante Datenquellen und können deren Qualität beurteilen. Sie sind in der Lage, neue, innovative Wirkstoffe für pharmazeutisch relevante Zielproteine abzuleiten. Die Studierenden erkennen welche theoretischen Methoden für das Lösen einer spezifischen Problemstellung des Wirkstoffdesigns am besten geeignet sind und wie computer-basierte Modelle validiert werden können.				
Inhalt	<p>In diesem Modul werden computergestützte Methoden des Wirkstoffdesigns betrachtet und auf reale Datensätze angewendet. Die spezifischen Problemfelder können variieren und beispielsweise aus den folgenden Bereichen stammen:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Konzepte des liganden- und strukturbasierten Wirkstoffdesigns • Konzepte der Leitstrukturidentifizierung und -optimierung • Chemische Datenbanken • Biologischen Daten: Aufbereitung, Qualitätsanalyse • Chemischer Raum, Similarität und Diversität • Virtuelles Screening: Pharmakophor- und shape-basierte Ansätze, Docking • Fokussierte Molekülbibliotheken: Virtuelle kombinatorische Chemie • de novo Design: Design innovativer Wirkstoffmoleküle basierend auf aktiven Molekülen und Proteinstrukturen • QSAR Methoden • Proteinmodellierung • ADME Vorhersage bzw. PK/PD Modellierung • Vorhersage von Bioaktivitätsspektren: Wirkung und unerwünschte Wirkungen/Toxizität, Selektivität • Modellierung biologischer Systeme 				
Lehrveranstaltungen und Lehrformen	Vorlesung Computer-unterstütztes Wirkstoffdesign			2 SWS	
	Übungen zu Computer-unterstütztes Wirkstoffdesign			2 SWS	
Arbeitsaufwand (Teilleistungen und insgesamt)		LP	P (Std)	S (Std)	PV (Std)
	Vorlesung Computer-unterstütztes Wirkstoffdesign	3	28	42	20
	Übungen zu Computer-unterstütztes Wirkstoffdesign	3	28	42	20
	Gesamt	6	56	84	40

Studien- /Prüfungsleistungen	<p>Studienleistungen: Regelmäßige und erfolgreiche Teilnahme an den Übungen; die Teilnahme gilt als erfolgreich, wenn alle Aufgaben bearbeitet wurden und ein überwiegender Anteil (mindestens 50%) in den Übungen abgenommen wurde; die Details zum abzunehmenden Anteil werden vom Veranstalter im ersten Veranstaltungstermin erläutert.</p> <p>Prüfungsleistungen: Gemeinsame Modulprüfung für alle Lehrveranstaltungen des Moduls; in der Regel schriftlich (Klausur) und in deutscher Sprache. Abweichungen werden vor der Anmeldung zum Modul bekannt gegeben.</p>
Dauer	1 Semester
Häufigkeit des Angebots	Jährlich
Literatur	Wird bekannt gegeben

Legende:

LP = Leistungspunkte

P (Std) = Präsenzzeit (Stunden)

S (Std) = Selbststudium (Stunden)

PV (Std) = Prüfungsvorbereitung (Stunden)