

Struktur und Funktion		7 CP					
Wahlpflichtmodul im Pflichtbereich Organische Chemie und Chemische Biologie							
Inhalte:							
Strukturbestimmung von Wirkstoffen und Biomakromolekülen als Grundlage zum Verständnis ihrer Funktion;							
<u>Röntgenstrukturanalyse:</u> Kristallsymmetrie und Raumgruppen, Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen, kristallographisches Phasenproblem, Ablauf einer Röntgenstrukturanalyse, Bestimmung der absoluten Konfiguration, Moleküldynamik in Kristallen, Ermittlung von Reaktionswegen aus Kristallstrukturen, Röntgenstrukturanalyse von Proteinen;							
<u>NMR-Spektroskopie:</u> theoretische Grundlagen der NMR-Spektroskopie, Einführung des Produktoperator-Formalismus zur Beschreibung von NMR-Experimenten, grundlegende NMR-Experimente, Abhängigkeit der NMR-Messgrößen von Strukturparametern und der Moleküldynamik, Strukturbestimmung von Proteinen und RNA;							
<u>Molecular Modelling:</u> Ziele und Vorgehensweise, Protein/Ligand-Wechselwirkungen, Struktur/Wirkungs-Beziehungen, strukturbasiertes Wirkstoffdesign, Kraftfeldmethoden, Konformationsanalyse von Biomakromolekülen							
Qualifikationsziele und Kompetenzen:							
Die Studierenden werden mit den wichtigsten Methoden zur Strukturbestimmung von Wirkstoffen und Biomakromolekülen vertraut gemacht und erwerben ein Verständnis für den komplexen Zusammenhang zwischen der dreidimensionalen Struktur von Molekülen und ihrer biologischen Funktion. Sie kennen die Möglichkeiten und Grenzen der verwendeten Strukturbestimmungsmethoden und sind in der Lage, den Informationsgehalt und die Zuverlässigkeit von publizierten Strukturen zu beurteilen. Darüber hinaus helfen ihnen die vermittelten Kenntnisse bei der Lösung von Strukturproblemen im Rahmen der späteren eigenen wissenschaftlichen Arbeit.							
Angebotszyklus:		einmal pro Jahr (im Wintersemester)					
Dauer des Moduls:		1 Semester					
Voraussetzung für die Teilnahme am Modul:		keine					
Organisatorisches:		Zur Vertiefung des Vorlesungsstoffs findet eine Übung statt; sie ist in die Vorlesung integriert. Es wird erwartet, dass sich die Studierenden daran aktiv beteiligen.					
Studiennachweise (Teilnahme- / Leistungsnachweise):		keine					
Modulabschlussprüfung / Prüfungsform:		Klausur					
Voraussetzung für die Vergabe der CP:		bestandene Modulabschlussprüfung					
Verwendbarkeit des Moduls in anderen Studiengängen:		Wahlpflichtmodul für Studierende der Masterstudiengänge Bioinformatik, Molekulare Biotechnologie und Physik					
Lehrveranstaltungen		Typ	SWS	Semester / CP			
				1	2	3	4
Struktur und Funktion		V + Ü	4	7			