



**Nr. 1575**

TU Verteiler 3

Aushang

*Herausgegeben von der  
Präsidentin der  
Technische Universität  
Braunschweig*

*Redaktion:  
Geschäftsbereich 1  
Universitätsplatz 2  
38106 Braunschweig  
Tel. +49 (0) 531 391-4338  
Fax +49 (0) 531 391-4340*

*Datum: 05.07.2024*

**Neufassung des Besonderen Teils der Prüfungsordnung für den Masterstudiengang „Artificial Intelligence for Molecular Sciences (AIMS)“ der Fakultät für Lebenswissenschaften der Technischen Universität Braunschweig**

Hiermit wird die vom Fakultätsrat der Fakultät für Lebenswissenschaften in der Sitzung am 18.06.2024 sowie vom Dekan der Fakultät für Lebenswissenschaften in Eilkompetenz beschlossene und vom Präsidium der Technischen Universität Braunschweig in der Sitzung am 03.07.2024 genehmigte Neufassung des Besonderen Teils der Prüfungsordnung für den Masterstudiengang „Artificial Intelligence for Molecular Sciences (AIMS)“ hochschulöffentlich bekannt gemacht.

Diese Ordnung tritt am 01.10.2024 in Kraft.

## **Besonderer Teil der Prüfungsordnung für den konsekutiven Masterstudiengang „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ an der Technischen Universität Braunschweig**

Der Fakultätsrat der Fakultät für Lebenswissenschaften hat am 18.06.2024 sowie das Dekanat der Fakultät für Lebenswissenschaften in Eilkompetenz am 20.06.2024 in Ergänzung zum Allgemeinen Teil der Prüfungsordnung für die Bachelor-, Master-, Diplom- und Magisterstudiengänge an der Technischen Universität Braunschweig (APO) folgenden Besonderen Teil der Prüfungsordnung für den Studiengang „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ mit dem Abschluss „Master of Science“ beschlossen.

### **INHALTSVERZEICHNIS**

§ 1 Regelungsgegenstand und Regelstudienzeit

§ 2 Hochschulgrad und Zeugnis

§ 3 Gliederung und Umfang des Studiums

§ 4 Mentoringsystem

§ 5 Studien- und Prüfungsleistungen

§ 6 Art und Umfang der Prüfungen

§ 7 Meldung und Zulassung zu Prüfungen

§ 8 Besondere Bedingungen bei der Masterarbeit

§ 9 Zusatzprüfungen

§ 10 Teilzeitstudium

§ 11 Inkrafttreten

Anlage 1: Studiengangsspezifische Bestandteile des Diploma Supplements

Anlage 2: Zuordnung der Module zu den Profilrichtungen

Anlage 3: Qualifikationsziele der Module

Anlage 4: Übersicht der Module inkl. Studienleistungen, Prüfungsleistungen und Leistungspunkten

## **§ 1 REGELUNGSGEGENSTAND UND REGELSTUDIENZEIT**

- (1) Diese Prüfungsordnung regelt insbesondere die Studienregelungen, Prüfungsmodalitäten und weitere Bestimmungen für den konsekutiven Masterstudiengang „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ der Fakultät für Lebenswissenschaften.
- (2) Der Masterstudiengang hat ein forschungsorientiertes Profil.
- (3) Die Studienzeit, in der das Studium abgeschlossen werden kann, beträgt einschließlich der Masterarbeit vier Semester (Regelstudienzeit). Das Lehr- und Prüfungsangebot ist so gestaltet, dass die Studierenden den Mastergrad innerhalb der Regelstudienzeit erwerben können.

## **§ 2 HOCHSCHULGRAD UND ZEUGNIS**

- (1) Nachdem die zum Bestehen der Masterprüfung erforderlichen 120 Leistungspunkte erworben wurden, wird der Hochschulgrad „Master of Science“ (abgekürzt: „M. Sc.“) im Fach „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ verliehen.
- (2) Über die Verleihung wird eine Urkunde gemäß Anlage 2 der APO in deutscher und englischer Sprache sowie ein Zeugnis gemäß Anlage 1 der APO in deutscher und englischer Sprache und ein Diploma Supplement in deutscher und englischer Sprache gemäß der Anlage 3 der APO ausgestellt.
- (3) Bei einer Gesamtnote von 1,3 oder besser wird das Prädikat „mit Auszeichnung“ verliehen. Das Prädikat ist zusätzlich zur Gesamtnote im Zeugnis anzugeben.

## **§ 3 GLIEDERUNG UND UMFANG DES STUDIUMS**

- (1) Das Studium gliedert sich in Module. Der erfolgreiche Abschluss eines Moduls setzt voraus, dass die zu dem Modul gehörenden Studien- und Prüfungsleistungen nach Anlage 4 erfolgreich erbracht wurden, damit die Qualifikationsziele nach Anlage 3 erreicht und die entsprechenden Leistungspunkte erworben werden.
- (2) Das Masterstudium gliedert sich in folgende Bereiche:
  - Grundlagenbereich (Pflichtbereich, 26 Leistungspunkte)
  - Vertiefungsbereich (Wahlpflichtbereich, 15 Leistungspunkte)
  - Profildbereich (Wahlpflichtbereich, 37 Leistungspunkte)
  - Schlüsselqualifikationsbereich (12 Leistungspunkte)
  - Masterarbeit (30 Leistungspunkte).Die in den einzelnen Bereichen belegbaren Module sind in Anlage 3 und 4 aufgeführt.
- (3) Im Grundlagenbereich (Pflichtbereich) sind die in Anlage 4 aufgeführten Module zu absolvieren. Im Vertiefungsbereich (Wahlpflichtbereich) sind aus den angebotenen Modulen (siehe Anlage 4) Module im Umfang von 15 LP zu absolvieren.
- (4) Im Profildbereich wählen die Studierenden eine der drei angebotenen Profildrichtungen „Chemical Synthesis and Drug Design“, „Spectroscopy and Imaging“ und „Data-Driven Biology“. Die in diesen Profildrichtungen angebotenen Module sind in Anlage 2 aufgeführt.

- (5) In der gewählten Profilrichtung sind jeweils ein Profil-Grundlagenmodul sowie weitere Module aus der gewählten Profilrichtung gemäß Anlage 2 zu absolvieren. Zusätzlich ist im gewählten Profilbereich ein Forschungspraktikum im Umfang von 12-17 LP zu absolvieren. Sind über die zu erbringende Leistungspunktzahl hinaus komplette Module erbracht worden, können auf Antrag die nicht zu wertenden Module festgelegt werden, sonst gilt die Wertung nach Belegungsreihenfolge. Der Antrag ist vor Ablegung der letzten Prüfung, die zum Bestehen des Studiums erforderlich ist, beim Prüfungsausschuss zu stellen.
- (6) Mit Zustimmung des Prüfungsausschusses können in der gewählten Profilrichtung maximal zwei Module aus einer anderen Profilrichtung eingebracht werden, wenn diese die Studienplanung sinnvoll ergänzen.
- (7) Maximal zwei Module, die nicht in den Anlagen aufgeführt sind, können auf Antrag an den Prüfungsausschuss im Vertiefungsbereich oder im Profilbereich genehmigt werden (Fleximodule), sofern diese die Studienplanung sinnvoll ergänzen.
- (8) Der Schlüsselqualifikationsbereich setzt sich aus dem Modul „Ethics and Epistemology“ und dem Modul „Professionalisierungsmodul“ zusammen und dient vorrangig dem Erwerb von Selbst-, Methoden- und Sozialkompetenzen. Er setzt sich aus entsprechenden Studienleistungen mit interdisziplinären und handlungsorientierten Angeboten zur Vermittlung von überfachlichen und berufspraktischen Qualifikationen / Kompetenzen zusammen (siehe Anlage 4).
- (9) Mit Zustimmung des Prüfungsausschusses können Leistungen, die zum Erwerb der Qualifikationsziele des Professionalisierungsmoduls beitragen, auch außerhalb eines Master- oder Bachelorstudiengangs der TU Braunschweig erbracht werden.

#### **§ 4 MENTORINGSYSTEM**

Die Studierenden erstellen gemeinsam mit der ihnen zugeteilten Mentorin bzw. dem ihnen zugeteilten Mentor zu Beginn des Studiums einen individuellen Studienplan, um spezifische Schwerpunkte zu setzen. Der von der Mentorin bzw. dem Mentor gegengezeichnete Studienplan ist vor Ende der Vorlesungszeit des ersten Semesters im Prüfungsamt einzureichen. Im Verlauf des Studiums ggf. notwendige Anpassungen des Studienplans nehmen die Studierenden gemeinsam mit der Mentorin bzw. dem Mentor vor. Der geänderte und von der Mentorin bzw. dem Mentor gegengezeichnete Studienplan ist im Prüfungsamt einzureichen.

#### **§ 5 STUDIEN- UND PRÜFUNGSLEISTUNGEN**

- (1) In Ergänzung zu § 9 Abs. 1 der APO sind folgende Leistungen als Studienleistungen zu bewerten:
  - a. Kolloquium: Ein Kolloquium ist eine mündliche Überprüfung in Form eines Gesprächs zwischen der bzw. dem Studierenden und der bzw. dem Lehrenden. Hierbei wird festgestellt, ob der bzw. die Studierende auf einen oder mehrere Praktikumsversuch/e vorbereitet ist und/oder in der Lage ist, die bearbeiteten Experimente und/oder Aufgaben und deren Lösung kritisch zu würdigen und darzustellen.

- b. Übungsaufgaben bzw. Hausaufgaben: Übungsaufgaben bzw. Hausaufgaben dienen der Auf- bzw. Nachbereitung der in der Lehrveranstaltung vermittelten Lehrinhalte. Hierbei sollen die Studierenden selbstständig die in der Lehrveranstaltung eingeführten Begrifflichkeiten und Methoden anhand von Beispielen üben und festigen.
  - c. Protokoll: Ein Protokoll beinhaltet die schriftliche Darstellung und kritische Würdigung der bearbeiteten Aufgabe und deren Lösung.
  - d. Laborjournal: Ein Laborjournal ist eine schriftliche Niederlegung sämtlicher Versuchsergebnisse im Laufe eines Praktikums. Dazu gehören u. a. auch Modifikationen im Material-Methoden-Teil, Abbildungen, Tabellen, Graphiken der Rohdaten und deren erste Auswertung. Ein Laborjournal ist chronologisch gegliedert, und die Autorin bzw. der Autor ist eindeutig zu identifizieren.
- (2) Der Antrag der bzw. des Studierenden, das Ergebnis der benoteten oder unbenoteten Studienleistung für Klausur+ oder Mündliche Prüfung+ zu berücksichtigen, muss spätestens mit Beginn der Prüfung gestellt werden.
- (3) Sollte die TU Braunschweig z. B. aufgrund einer Pandemielage von außen gezwungen sein, Präsenzprüfungen auszusetzen, kann abweichend von der in Anlage 4 angegebenen Prüfungsart zwei Wochen vor der Prüfung ein Wechsel der Prüfungsart zwischen Klausur bzw. Klausur+ und Take-Home-Examen gem. § 9 d APO vorgenommen werden, sofern eine Gleichwertigkeit der abzuprüfenden Kompetenzen vorliegt. Die Wahl der jeweiligen Prüfungsart obliegt in diesen Fällen den Prüfenden.

## **§ 6 ART UND UMFANG DER PRÜFUNGEN**

- (1) Die Prüfungsinhalte ergeben sich aus den Qualifikationszielen der einzelnen Module gemäß Anlage 3, die sich aus den beruflichen Anforderungen ergeben, welche hilfsweise herangezogen werden können.
- (2) Die Sprache der Lehrveranstaltungen und Prüfungen ist grundsätzlich Englisch. Über Ausnahmen entscheidet der Prüfungsausschuss.
- (3) Bei der Festlegung der Bearbeitungsdauer ist die Anzahl der dem Modul zugeordneten Leistungspunkte zu berücksichtigen: Pro Leistungspunkt werden ca. 20 Minuten für schriftliche Modulabschlussprüfungen und ca. fünf Minuten für mündliche Modulabschlussprüfungen, die auch schriftliche Elemente enthalten können, angesetzt.

## **§ 7 MELDUNG UND ZULASSUNG ZU PRÜFUNGEN**

- (1) Die Zulassung zu den einzelnen Modulprüfungen ist im Online-Verfahren beim Prüfungsausschuss oder der von ihm beauftragten Stelle bis spätestens 1 Woche vor dem Prüfungstermin zu beantragen. In entsprechender Form ist der Rücktritt von einer Prüfung im Sinne von § 11 Abs. 1 APO zu erklären.
- (2) In den Praktika sowie den praktikumsvorbereitenden und praktikumsbegleitenden Seminaren besteht Anwesenheitspflicht. Bei Fehlzeiten kann in begründeten Einzelfällen (z. B. bei Krankheit) der Nachweis über das Erbringen des erforderlichen Lernzieles in Absprache mit der bzw. dem Prüfenden in geeigneter Form nachgeholt werden.

- (3) Entsprechend § 13 Abs. 4 S. 2 der APO müssen in maximal drei Fällen Prüfungen in Wahl- und Wahlpflichtmodulen, die außerhalb der Regelstudienzeit im ersten Versuch nicht bestanden wurden, nicht wiederholt werden.

### **§ 8 BESONDERE BEDINGUNGEN BEI DER MASTERARBEIT**

- (1) Die Masterarbeit wird in der Regel im 4. Semester durchgeführt. Sie umfasst 30 Leistungspunkte.
- (2) Das Thema der Masterarbeit muss eine Fragestellung aus dem Themenfeld „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ im weiteren Sinne beinhalten und soll so gewählt werden, dass es inhaltlich zum gewählten Profilbereich passt.
- (3) Die Masterarbeit ist in englischer Sprache abzufassen. Über Ausnahmen entscheidet der Prüfungsausschuss. Der Antrag muss spätestens zum Zeitpunkt der Anmeldung der Masterarbeit an den Prüfungsausschuss gestellt werden. Der nicht englischsprachigen Masterarbeit ist eine englischsprachige Zusammenfassung beizufügen.
- (4) Voraussetzung für die Zulassung zur Masterarbeit ist, dass nachweislich Studien- und Prüfungsleistungen im Umfang von mindestens 75 Leistungspunkten erbracht wurden. Der Prüfungsausschuss kann in begründeten Fällen (z. B. wenn Module aus Gründen, die nicht von den Studierenden zu verantworten sind, noch nicht abgeschlossen werden konnten) auf Antrag Ausnahmen von dieser Regelung zulassen.
- (5) Den Studierenden wird die Gelegenheit gegeben, ihre Masterarbeit im Rahmen des Arbeitsgruppen- oder Institutsseminars zu präsentieren.

### **§ 9 ZUSATZPRÜFUNGEN**

- (1) Abweichend von § 18 Abs. 1 Satz 2 der APO kann der Antrag auf die Wertung als Zusatzprüfung auch nach Ablegung der Studien- oder Prüfungsleistung, spätestens jedoch bis zu dem Tag, an dem die letzte für den erfolgreichen Abschluss des Studiums erforderliche Studien- oder Prüfungsleistung abgelegt wurde, erfolgen.
- (2) Entsprechend § 18 Abs. 1 Satz 7 APO wird festgelegt, dass bestandene Prüfungsleistungen in Wahl- und Wahlpflichtbereichen durch Zusatzprüfungen ersetzt werden können, sofern diese den zu ersetzenden Prüfungsleistungen in Inhalt und Umfang entsprechen. Der Antrag ist vor Ablegung der letzten Prüfung, die zum Bestehen des Studiums erforderlich ist, beim Prüfungsausschuss zu stellen.

### **§ 10 TEILZEITSTUDIUM**

Der Studiengang ist für ein Teilzeitstudium gemäß der Immatrikulationsordnung der TU Braunschweig geeignet.

### **§ 11 INKRAFTTRETEN**

Diese Prüfungsordnung tritt am 01.10.2024 in Kraft.

# Anlage 1 – Studiengangsspezifische Bestandteile des Diploma Supplements

## 2.1 Bezeichnung der Qualifikation (ausgeschrieben, abgekürzt)

Master of Science (M. Sc.)

## 2.2 Hauptstudienfach oder –fächer für die Qualifikation

Artificial Intelligence for Molecular Sciences

## 2.5 Im Unterricht / in der Prüfung verwendete Sprache(n)

Englisch

## 3.1 Ebene der Qualifikation

Master-Studium, forschungsorientiert  
weiterführender Hochschulabschluss

## 3.2 Dauer des Studiums (Regelstudienzeit)

Zwei Jahre (inkl. schriftlicher Abschlussarbeit), 120 ECTS Leistungspunkte

## 3.3 Zugangsvoraussetzung(en)

Bachelorabschluss oder gleichwertiger Abschluss in Chemie, Lebensmittelchemie, Biologie, Biotechnologie oder in einem anderen fachlich geeigneten Studiengang

## 4.1 Studienform

Vollzeitstudium

## 4.2 Anforderungen des Studiengangs/Qualifikationsprofil des Absolventen/der Absolventin

Im Masterstudiengang „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ (AIMS) erwerben die Studierenden eine vertiefte wissenschaftliche Ausbildung und die Fähigkeit zum selbstständigen wissenschaftlichen Arbeiten. Die Studierenden werden in datengestützten Methoden sowie in Methoden der künstlichen Intelligenz ausgebildet und zur Anwendung dieser Methoden in den molekularen Wissenschaften befähigt werden. Zur Profilbildung werden drei Anwendungsprofile „Chemical Synthesis and Drug Design“, „Spectroscopy and Imaging“ sowie „Data-Driven Biology“ angeboten.

Durch den Schlüsselqualifikationsbereich erwerben die Studierenden Zusatzqualifikationen. Sie können aus Veranstaltungen wählen, die z. B. Sprachkompetenz, Sozialkompetenz, Projektmanagement und fremde Fachkulturen vermitteln. Durch die abschließende Masterarbeit, für deren Bearbeitung sechs Monate vorgesehen sind, wird die Befähigung zu eigenständiger wissenschaftlicher Arbeit nachgewiesen.

Die Absolventinnen und Absolventen des Masterstudiengangs „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ (AIMS)

- sind in der Lage, Datensätze in den molekularen Wissenschaften zu erheben, zu kuratieren, zu analysieren und zu visualisieren.
- können datengestützte Analysemethoden und Algorithmen der künstlichen Intelligenz für verschiedene Fragestellungen kompetent auswählen, kombinieren, und ggf. anpassen und weiterentwickeln.
- können Forschungssoftware für ausgewählte Anwendungen nachhaltig entwickeln.
- besitzen vertiefte Spezialkenntnisse in mindestens einem Spezialgebiet der molekularen Wissenschaften.
- sind in der Lage, datengestützte Methoden und Methoden der künstlichen Intelligenz für Anwendungen in den molekularen Wissenschaften auszuwählen und diese selbstständig anzuwenden, um Probleme zu analysieren und ggf. zu lösen.
- sind in der Lage, wissenschaftliche Publikationen zu verstehen und die darin beschriebenen Methoden in der eigenen Arbeit umzusetzen.
- sind in der Lage, selbstständig eine wissenschaftliche Problemstellung zu lösen und dafür wissenschaftliche und technische Daten zu erarbeiten, interpretieren, bewerten und fundierte Urteile abzugeben, die wissenschaftliche, technologische und ethische Aspekte berücksichtigen.

## 2.1 Name of Qualification (full, abbreviated; in original language)

Master of Science (M. Sc.)

## 2.2 Main Field(s) of Study

Artificial Intelligence for Molecular Sciences

## 2.5 Language(s) of Instruction/Examination

English

## 3.1 Level

Master's degree (graduate/second degree), by research with thesis

## 3.2 Official Length of Programme

Two years (120 ECTS credits)

## 3.3 Access Requirements

Bachelor degree or similar degree in Chemistry, Food Chemistry, Biology, Biotechnology or in thematically related field

## 4.1 Mode of Study

Full-time

## 4.2 Programme Requirements/Qualification Profile of the Graduate

The Masters programme „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ (AIMS) Chemistry provides the students with an advanced scientific education and with the ability to undertake independent scientific investigations. The students are educated in data-driven methods as well as methods of artificial intelligence and are able to apply such methods in the molecular sciences. For specialization, the three profile areas „Chemical Synthesis and Drug Design“, „Spectroscopy and Imaging“, and „Data-Driven Biology“ are offered.

Courses on key competences gives students the chance to acquire additional qualifications. They can choose between courses that offer e. g. foreign languages, social skills, project management or insights into completely different branches of scientific culture. To complete their studies, the students have to write a Master's Thesis, for which 30 ECTS points are awarded. During their six-months Master project, the students demonstrate their ability to carry out independent scientific research.

The Graduates of the Master Study Course „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ (AIMS)

- are able to curate, to analyze, and to visualize data sets in the molecular sciences.
- can select, combine and, when necessary, adapt and improve data-driven methods and algorithms of artificial intelligence for different.
- can develop scientific software for selected applications in a sustainable fashion.
- have specialized knowledge in at least one area of the molecular sciences.
- are able to select and independently apply data-driven methods and methods of artificial intelligence for applications in the molecular sciences for analyzing and possibly solving scientific problem.
- are able to read and understand scientific publications and to incorporate the corresponding methods into their work.
- are able to solve scientific problems on their own and, to this end, collect scientific and technical data, analyze them and draw conclusions that take into account scientific, technological and ethic aspects.

- sind in der Lage, ihre wissenschaftliche Arbeit mündlich und schriftlich zu diskutieren und eine wissenschaftliche Publikation zu verfassen.
- können erfolgreich interdisziplinär in einer Gruppe arbeiten und können ihre erarbeiteten wissenschaftlichen Ergebnisse angemessen darstellen und diskutieren.
- können effizient mit Fachvertretungen und mit anderen Zielgruppen kommunizieren.
- sind damit befähigt, eine wissenschaftliche Tätigkeit mit dem Ziel einer Promotion auszuüben.

#### 4.3 Einzelheiten zum Studiengang

Einzelheiten zu den belegten Kursen und erzielten Noten sind im Zeugnis enthalten, gleiches gilt für das Thema und die Bewertung der Abschlussarbeit. Einzelheiten zu möglichen Auslandsaufenthalten

- zu Studienzwecken siehe Transcript of records der Gasthochschule oder Vergleichbares
- zu Praktikumszwecken siehe Praktikumszeugnis oder Vergleichbares
- zu Forschungszwecken siehe Forschungsbericht oder Vergleichbares

#### 4.4 Notensystem und Hinweise zur Vergabe von Noten

Allgemeines Notenschema (Abschnitt 8.6):

- 1,0 bis 1,5 = „sehr gut“
- 1,6 bis 2,5 = „gut“
- 2,6 bis 3,5 = „befriedigend“
- 3,6 bis 4,0 = „ausreichend“
- Schlechter als 4,0 = „nicht bestanden“

1,0 ist die beste Note. Zum Bestehen der Prüfung ist mindestens die Note 4,0 erforderlich.

Ist die Gesamtnote 1,3 oder besser, wird das Prädikat „mit Auszeichnung“ vergeben. Die Gesamtnote ergibt sich aus den nach Leistungspunkten gewichteten Einzelnoten.

ECTS Note: Nach dem European Credit Transfer System (ECTS) ermittelte Note auf der Grundlage der Ergebnisse der Absolventinnen und Absolventen der zwei vergangenen Jahre: A (beste 10 %), B (nächste 25 %), C (nächste 30 %), D (nächste 25 %), E (nächste 10 %)

#### 6.1 Weitere Angaben

Entfällt

#### 6.2 Informationsquellen für ergänzende Angaben

[www.tu-braunschweig.de](http://www.tu-braunschweig.de)  
[www.tu-braunschweig.de/flw](http://www.tu-braunschweig.de/flw)

- are able to present and discuss their own scientific results orally and in writing and are able to write a scientific publication.
- can work in interdisciplinary teams and are able to present and discuss their scientific results adequately.
- are able to communicate efficiently with representatives of their own subject and with other target groups.
- are thus able to pursue an advanced scientific research project with the goal of obtaining a Doctorate.

#### 4.3 Programme Details

Details of courses taken and grades achieved are included in the certificate (“Zeugnis”); the same applies to the topic and the grading of the final thesis.

Information regarding possible stays abroad during studies

- for study purposes, see transcript of records or equivalent documents
- for internship purposes, see internship certificate or equivalent documents
- for research purposes, see research report or equivalent documents

#### 4.4 Grading System

General grading scheme (Sec. 8.6):

- 1.0 to 1.5 = “excellent”
- 1.6 to 2.5 = “good”
- 2.6 to 3.5 = “satisfactory”
- 3.6 to 4.0 = “sufficient”
- Inferior to 4.0 = “non-sufficient”

1.0 is the highest grade, the minimum passing grade is 4.0.

In case the overall grade is 1.3 or better the degree is granted “with honors”.

The overall grade is the average of the student’s grades weighted by the number of credits given for each course.

In the European Credit Transfer System (ECTS) the ECTS grade represents the percentage of successful students normally achieving the grade within the last two years: A (best 10 %), B (next 25 %), C (next 30 %), D (next 25 %), E (next 10 %)

#### 6.1 Additional Information

Not applicable

#### 6.2 Further Information Sources

[www.tu-braunschweig.de](http://www.tu-braunschweig.de)  
[www.tu-braunschweig.de/flw](http://www.tu-braunschweig.de/flw)



## **Anlage 2 – Zuordnung der Module zu den Profilirichtungen**

### ***Profilirichtung „Chemical Synthesis and Drug Design“ (37 LP)***

<b>Modulangebot Profilirichtung A „Chemical Synthesis and Drugs“</b>		<b>LP</b>
AM-A-1 Reaction Mechanisms	Profil-Grundlagenmodul	4
AM-A-2 Organometallic Chemistry	Profil-Grundlagenmodul	4
AM-A-3 Catalysis		8
AM-A-4 Advanced Inorganic Chemistry		8
AM-A-5 Organic Synthesis Planning		4
AM-A-6 Enzyme Engineering		10
AM-A-7 Fundamentals of Protein Structure Analysis		10
AM-A-8 Biomolecular Modelling		8
AM-A-9 Advanced Theoretical Chemistry		8
AM-A-10 Machine Learning in Computational Chemistry		8
AM-A-RP Forschungspraktikum „Chemical Synthesis and Drug Design“		13-17

In der Profilirichtung „Chemical Synthesis and Drug Design“ ist eines der beiden Profil-Grundlagenmodule (4 LP) zu absolvieren (Pflichtmodul). Zusätzlich sind weitere Module im Umfang von 16 – 20 LP sowie ein Forschungspraktikum im Umfang von 13 – 17 LP zu absolvieren.

### ***Profilirichtung „Spectroscopy and Imaging“ (37 LP)***

<b>Modulangebot Profilirichtung B „Spectroscopy and Imaging“</b>		<b>LP</b>
AM-B-1 Molecular Spectroscopy	Profil-Grundlagenmodul	5
AM-B-2 Biophysical Chemistry		8
AM-B-3 Modern Optical Methods und Imaging		8
AM-B-4 Solar and Chemical Energy Conversion		8
AM-B-5 Physical Biology of the Cell		10
AM-B-6 Sophisticated Imaging		10
AM-B-7 Chemometrics		6
AM-B-8 Theoretical Spectroscopy		8
AM-A-10 Machine Learning in Computational Chemistry		8
AM-B-RP Forschungspraktikum „Spectroscopy and Imaging“		12-16

In der Profilirichtung „Spectroscopy and Imaging“ sind das Profil-Grundlagenmodul (5 LP), weitere Module im Umfang von 16 – 20 LP sowie ein Forschungspraktikum im Umfang von 12 – 16 LP zu absolvieren.

### ***Profilirichtung „Data-Driven Biology“ (37 LP)***

<b>Modulangebot Profilirichtung C „Data-Driven Biology“</b>		<b>LP</b>
AM-C-1 Molecular Microbial Evolution and Diversity	Profil-Grundlagenmodul	10
AM-C-2 Immunometabolism		10
AM-C-3 Comparable Quantitative Measurements and Metabolomics Biomarker Signature to Predict Case and Control		7
AM-C-4 Network Biology		5
AM-C-5 Molecular Phylogenetics and Taxonomy		10
AM-C-6 Data Literacy and Genome Research		10
AM-C-7 Applied Plant Transcriptomics		10
AM-C-8 Functional Genomics in Infection Biology		10
AM-C-9 Microbial Proteomics		10
AM-C-RP Forschungspraktikum „Data-Driven Biology“		12-17

In der Profilirichtung „Data-Driven Biology“ sind das Profil-Grundlagenmodul (10 LP), weitere Module im Umfang von 10 – 15 LP sowie ein Forschungspraktikum im Umfang von 12 – 17 LP zu absolvieren.

## **Anlage 3 – Qualifikationsziele der Module**

### **Grundlagenbereich**

#### ***Introduction to AIMS***

[DEU] Die Studierenden besitzen einen Überblick über aktuelle Themen und Herausforderungen im Forschungsfeld „Artificial Intelligence in Molecular Sciences“. Sie sind mit verschiedenen Arten von Forschungsdaten, die in den molekularen Wissenschaften anfallen vertraut und sind in der Lage einfache Analysen solcher Datensätze durchzuführen. Sie sind mit den Methoden und Werkzeugen des Forschungsdatenmanagements in den molekularen Wissenschaften vertraut.

[ENG] Students have an overview of current topics and challenges in the research field "Artificial Intelligence in Molecular Sciences". They are familiar with different types of research data generated in the molecular sciences and are able to carry out simple analyses of such data sets. They are familiar with the methods and tools of research data management in the molecular sciences.

#### ***Mathematics for Engineers A***

[DEU] Die Studierenden kombinieren die erlernten mathematische Methoden der univariaten Analysis und der linearen Algebra zur Beschreibung und Analyse angewandter Probleme aus den technischen Wissenschaften. Sie wählen geeignete Rechen- und Beweisverfahren zur Behandlung der mathematisch formulierten Grundlagen der angewandten und technischen Wissenschaften aus und wenden diese an. Darüber hinaus erklären die Studierenden die mathematische Begriffsbildung und begründen ihre Motivation aus den Anwendungen und aus der mathematischen Begriffsspezifizierung und -abgrenzung. Sie reproduzieren und erklären grundlegende Beweise und Beweisideen der Analysis und der linearen Algebra, und sie sind in der Lage, Zusammenhänge zwischen den erlernten Begriffen selbständig zu identifizieren und zu prüfen. Die Studierenden sind in der Lage, mathematische Fragestellungen aus Ingenieurmathematik A und den Anwendungen in technischen Fächern zu analysieren, behandelbare Teilfragen herauszuarbeiten und zu lösen und weiterführende Schwierigkeiten zu erkennen. Schließlich verwenden die Studierenden zielführend moderne technische Hilfsmittel zur Behandlung mathematischer Rechenprobleme.

[ENG] Students combine the mathematical methods they have learned in univariate analysis and linear algebra to describe and analyze applied problems from the technical sciences. They select and apply suitable calculation and proof methods for dealing with the mathematically formulated fundamentals of applied and technical sciences. In addition, students explain the mathematical concept formation and justify their motivation from the applications and from the mathematical concept specification and delimitation. They reproduce and explain basic proofs and proof ideas of analysis and linear algebra, and they are able to independently identify and check connections between the concepts they have learned. Students are able to analyze mathematical problems from Engineering Mathematics A and the applications in technical subjects, to work out and solve treatable sub-questions and to recognize further difficulties. Finally, students will be able to use modern technical tools to solve mathematical problems.

#### ***Programming in Python and Python Lab***

[DEU] Nach erfolgreichem Abschluss dieses Moduls sind die Studierenden in der Lage, Python für den Entwurf und die Implementierung kleinerer bis mittlerer Softwareprojekte und analytischer Workflows mit Schwerpunkt auf Statistik und maschinellem Lernen einzusetzen. Während einer interaktiven Lernphase werden die Studierenden in der Lage sein, gängige Pakete wie scikit-learn anzuwenden und Analyse-Workflows für verschiedene datenwissenschaftliche Fragestellungen zu synthetisieren. Diese Arbeitsabläufe werden in einer Mini-Konferenz vorgestellt und unter den Studierenden diskutiert. Nach der Minikonferenz werden die Studierenden in kleinen Teams Data-Science-Softwaretools entwickeln, die in der Abschlussveranstaltung präsentiert werden. Sie werden die Kompetenz erlangen, maschinelle Lernabläufe kritisch zu bewerten.

[ENG] After successful completion of this module, students will have the competence to apply Python for designing and implementing small to medium software projects and analytic workflows with a focus on statistics and machine learning. During an interactive learning phase during which the students will be able to apply common packages such as scikit-learn, and they will be able to synthesize analysis workflows for diverse data science questions. These workflows will be presented and discussed in a mini-conference among the students. After the mini-conference, students will form small teams to develop data science software tools which will be presented during the closing event. They will gain the competence to critically evaluate machine learning workflows.

## **Scientific Software Engineering – Lab**

[DEU] Die Studierenden sind in der Lage, für mäßig komplexe Ingenieurprobleme Hilfe von fortgeschrittenen Entwurfs- und Implementierungsansätzen nachhaltige Softwarelösungen für den wissenschaftlichen Kontext zu entwickeln. Darüber hinaus werden sie in der Lage sein, Softwareentwürfe hinsichtlich verschiedener Qualitätsaspekte zu bewerten und entsprechend eigenständige Entwurfsentscheidungen zu treffen und umzusetzen.

[ENG] Students are able to develop sustainable software solutions in the scientific contexts for moderately complex engineering problems using advanced design and implementation approaches. Furthermore, they will be able to evaluate software designs with respect to various quality aspects and to make independent design decisions and implement corresponding solutions.

## **Vertiefungsbereich**

### **Introduction to Machine Learning**

[DEU] Nach erfolgreichem Abschluss des Moduls verfügen die Studierenden über die folgenden Kenntnisse und Fähigkeiten. Sie sind in der Lage

- grundlegende Konzepte des maschinellen Lernens zu verstehen und korrekt anzuwenden.
- ein maschinelles Lernproblem zu analysieren und zu formalisieren.
- zwischen typischen Methoden des maschinellen Lernens zu unterscheiden.
- eine geeignete Methode für ein Lernproblem auszuwählen.
- Methoden des maschinellen Lernens hinsichtlich ihrer Leistungsfähigkeit vergleichen und zu beurteilen.
- Methoden des maschinellen Lernens zu implementieren und praktisch anwenden entsprechende Werkzeuge anzuwenden und parametrisieren.
- Stärken und Schwächen des maschinellen Lernens in Anwendungen beurteilen.
- ethische Fragen bei der Anwendung von maschinellem Lernen zu erkennen.

[ENG] With successful completion of the module, the students possess the following knowledge and capabilities. They are able to

- understand and correctly apply basic concepts of machine learning.
- analyse and formalize a machine learning problem.
- distinguish between typical machine learning methods.
- select a suitable method for a learning problem.
- compare and judge machine learning methods wrt their capacity.
- implement machine learning methods and apply them practically apply and parametrise respective tools.
- judge strength and weaknesses of machine learning in applications.
- recognize ethical issues in the application of machine learning.

### **Pattern Recognition**

[DEU] Nach Abschluss des Moduls besitzen die Studierenden grundlegende Kenntnisse über Methoden und Algorithmen zur Klassifikation von Daten und sind befähigt, diese Verfahren für Probleme der Praxis geeignet auszuwählen, zu entwerfen und zu bewerten.

[ENG] Upon completion of this module, students gain fundamental knowledge about methods and algorithms for classification of data. They are capable to select the appropriate means for real-world problems, to design a solution and to evaluate it.

### **Computer Lab Pattern Recognition**

[DEU] Die Studierenden erwerben die Kompetenzen, selbständig geeignete Methoden des maschinellen Lernens und des Deep Learning für komplexe Problemstellungen auszuwählen und anzuwenden. Die Studierenden

- beherrschen die Programmiersprache Python sowie die Grundlagen der Deep-Learning-Bibliotheken PyTorch und Tensorflow.
- bewerten die Effektivität von einfachen Machine-Learning-Modellen und neuronalen Netzen für Klassifikations- und Regressionsprobleme.
- die Qualität von Deep-Learning-Modellen auf geeigneten Daten(unter)sätzen mit aussagekräftigen Metriken zu bewerten.
- verschiedene Typen von neuronalen Netzen für Probleme aus den Bereichen Bildverarbeitung, Zeitreihenverarbeitung und generative Probleme kennen und anwenden können.
- unterschiedliche Strategien zur Datenvorverarbeitung und Datenanreicherung kennen und anwenden können.
- können verschiedene Trainings- und Regularisierungsmethoden zur Optimierung neuronaler Netze kennen und anwenden.
- die Komplexität eines neuronalen Netzes in Abhängigkeit von verschiedenen Parametern bewerten.

[ENG] In this course, students acquire the competencies to independently select and apply appropriate machine learning and deep learning methods for complex problems. The students ...

- master the programming language Python as well as the basics of the deep learning libraries PyTorch and Tensorflow.
- evaluate the effectiveness of simple machine learning models and neuronal networks for classification and regression problems.
- evaluate the quality of deep learning models on appropriate data (sub)sets with meaningful metrics.
- know and use different types of neural networks for problems in the areas of image processing, time series processing and generative problems.
- know and use different strategies for data preprocessing and data augmentation.
- know and use different training and regularization methods for the optimization of neural networks.
- evaluate the complexity of a neural network on the basis of various parameters.

### **Deep Learning Lab**

[DEU] Das Deep Learning Lab unterteilt sich in 3 Praxisphasen:

In der ersten Phase bekommen die Studierenden eine interaktive Einführung in die Programmiersprache Python und die benötigten Bibliotheken.

In der zweiten angeleiteten Praxisphase sollen die Studierenden Aufgaben zu den genannten Methoden bearbeiten. Sie erwerben damit die Kompetenz, bisher nur theoretisch kennengelernte Methoden zum maschinellen Lernen praxisnah anhand kleiner Aufgabenstellungen anzuwenden.

In der dritten Praxisphase, der sog. Deep Learning Challenge, werden die vermittelten Methoden dann selbstständig angewandt. Die Studierenden bekommen hier Daten – oftmals aus dem industriellen Anwendungsbereich – zur Verfügung gestellt und erhalten als Aufgabe, mit den gelernten Methoden ein eigenes System zur Mustererkennung zu entwickeln. Die Studierenden sollen dabei im Wettbewerb untereinander eine bestmögliche Erkennungsgenauigkeit mit ihrem System erreichen.

Im Modul erwerben die Studierenden die Kompetenz, selbstständig ein gegebenes Problem zu analysieren, geeignete Lösungsmöglichkeiten und Methoden des maschinellen Lernens abzuwägen und bezüglich ihrer Funktionsfähigkeit zu bewerten. Außerdem entwickeln die Studierenden selbstständig in Klein-Teams eine geeignete Methode zur Lösung der gegebenen Challenge.

[ENG] The Deep Learning Lab is divided in three parts:

First, the students work themselves through an introduction to the Python programming language and all required libraries for the later experiments to obtain some basic knowledge.

Second, the students will work with certain machine learning methods which are introduced in the Pattern Recognition lecture. They acquire the competence to practically apply theoretical methods for machine learning to solve small given problems.

Third, – in the so-called Machine Learning Challenge – students are required to use their obtained knowledge to develop a machine learning system in competition with the other participating teams. Therefore, the students will be provided with data which might stem from real-world/industry applications.

In the module, students acquire the competence to independently analyze a given problem, weigh suitable solution options and methods and evaluate them in terms of their functionality. In addition, students independently develop a suitable method for solving the given challenge.

### **Methods of Uncertainty Analysis and Quantification**

[DEU] Die Studierenden können die Grundregeln der Wahrscheinlichkeitsrechnung und die verschiedenen elementaren Beschreibungen von Wahrscheinlichkeitsverteilungen sowie Beispiele von Verteilungen benennen. Sie können physikalisch/technische Systeme stochastisch mit Hilfe von Zufallsvariablen modellieren. Die Studierenden können außerdem Monte Carlo und stochastische Spektralverfahren zur Quantifizierung von Unsicherheiten anwenden und durch Methoden der Sensitivitätsanalyse die Auswirkungen und Ausbreitung von Unsicherheiten in Modellen analysieren. Sie sind außerdem in der Lage, die numerische Effizienz dieser Verfahren zu beurteilen. Die Studierenden können die Vorgehensweise bei der datengetriebenen Unsicherheitsquantifizierung erläutern.

[ENG] Students can formulate and name elementary rules of probability theory and different ways to describe probability distributions. They can model technical/physical systems in a stochastic way using random variables. The students are further able to apply Monte Carlo and stochastic spectral methods to quantify uncertainties and also to assess the impact and propagation of uncertainties in models through global sensitivity analysis. Moreover, they are able to evaluate the numerical efficiency of the aforementioned methods. The students are also able to outline the principles of data-driven approaches to uncertainty analysis.

## **Profilbereich A „Chemical Synthesis and Drug Design“**

### ***Reaction Mechanisms***

[DEU] Die Studierenden verstehen die chemische Reaktivität von organischen Molekülen und sind in der Lage, chemische Reaktionen gezielt zur Modifikation von Molekülen anzuwenden. Dabei sind sie fähig, die zugrundeliegenden organisch-chemischen Reaktionsmechanismen zu formulieren und zu klassifizieren. Mit deren Hilfe gelingt es ihnen, sinnvolle Aussagen über den Erfolg geplanter Reaktionswege vom Ausgangs- zum Zielmolekül machen zu können sowie Haupt- und Nebenprodukte zu erklären. Die Studierenden kennen Methoden zur Aufklärung von Reaktionsmechanismen und können deren Einsatzbreite und Aussagekraft beurteilen und diskutieren.

[ENG] The students understand the chemical reactivity of organic molecules and are able to apply chemical reactions specifically to modify molecules. They are able to formulate and classify the underlying organic chemical reaction mechanisms. With their help, they are able to make meaningful statements about the success of planned reaction paths from the starting molecule to the target molecule and to explain the main and by-products. The students know methods to explain reaction mechanisms and can assess and discuss their range of application and significance.

### ***Organometallic Chemistry***

[DEU] Die Studierenden beherrschen weiterführende Konzepte der Chemie der Metalle, der Koordinationschemie und der Organometallchemie. Sie verstehen die Rolle von Metallen in der Natur und sind mit den Grundlagen der Bioanorganischen und Biometallorganischen Chemie vertraut. Sie können mit Hilfe moderner Bindungskonzepte die Struktur und Eigenschaften von Metallkomplexen diskutieren und vorhersagen und besitzen Kenntnisse über den Einsatz von Übergangsmetallverbindungen in industriellen Verfahren. Sie kennen die Prinzipien der homogenen und heterogenen Katalyse und sind in der Lage, wichtige Elementarreaktionen zu Katalysezyklen zusammenzuführen und Katalysezyklen zu formulieren.

[ENG] Students master advanced concepts in the chemistry of metals, coordination chemistry, and organometallic chemistry. They understand the role of metals in nature and are familiar with the fundamentals of bioinorganic and bioorganometallic chemistry. They can discuss and predict the structure and properties of metal complexes using modern bonding concepts and have knowledge of the use of transition metal complexes in industrial processes. They know the principles of homogeneous and heterogeneous catalysis and are able to combine important elementary reactions into catalytic cycles and formulate them.

### ***Catalysis***

[DEU] Die Studierenden beherrschen die Grundprinzipien der homogenen Katalyse und ihrer Abgrenzung zur heterogenen Katalyse und können die zugrundeliegenden Elementarreaktionen auf katalytische Prozesse sicher anwenden. Sie besitzen einen Überblick über die wichtigsten metallkatalysierten industriellen Verfahren sowie über aktuelle Entwicklungen und moderne Aspekte der Katalyseforschung. Die Studierenden kennen Verfahren der metallkatalysierten Polymersynthese und sind in der Lage, die Vorteile dieser Verfahren gegenüber klassischen nicht-katalytischen Verfahren zu beurteilen und zu diskutieren. Sie kennen Methoden zur Charakterisierung von Polymeren sowie deren Einsatzbereiche und sind in der Lage diese Methoden zu beurteilen.

[ENG] The students master the basic principles of homogeneous catalysis and the differentiation to heterogeneous catalysis and can confidently apply the underlying elementary reactions to catalytic processes. They have an overview of the most important metal-catalyzed industrial processes as well as of current developments and modern aspects of catalysis research. The students are familiar with methods of metal-catalyzed polymer synthesis and are able to evaluate and discuss the advantages of these methods compared to classical non-catalytic methods. They are familiar with methods for the characterization of polymers as well as their fields of application and are able to evaluate these methods.

### ***Advanced Aspects in Inorganic Chemistry***

[DEU] Die Studierenden sind in der Lage, anorganische Molekülverbindungen und Strukturen gezielt aufzubauen und hinsichtlich ihrer Struktur-Wirkungsbeziehungen zu interpretieren und zu verändern. Ihr Verständnis der Funktion anorganischer Verbindungen in der Biosphäre sowie in supramolekularen Aggregaten erlaubt den Studierenden die Diskussion neuartiger Modellverbindungen, Schalter, Magnete und Katalysatoren auf Übergangsmetallbasis. Ungewöhnliche Struktur- und Bindungsverhältnisse werden kompetent bewertet. Die Studierenden besitzen zudem Kenntnisse zur Interpretation und Modellierung von Spektren paramagnetischer Verbindungen und wenden diese selbstständig an.

[ENG] The students are able to specifically build up inorganic molecular compounds and structures and to interpret and modify them with regard to their structure-activity relationships. Their understanding of the function of inorganic compounds in the biosphere as well as in supramolecular aggregates allows the students to discuss novel model

compounds, switches, magnets and catalysts based on main group- and transition metals. Unusual structural and bonding relationships are competently evaluated. Students also have knowledge of interpreting and modelling spectra of paramagnetic compounds, and apply these independently.

### **Organic Synthesis Planning**

[DEU] Auf Basis datenbankgestützter retrosynthetischer Analyse sind die Studierenden in der Lage, mehrstufige Synthesesequenzen für komplexe organische Verbindungen vorzuschlagen, insbesondere für Natur- und Wirkstoffe.

[ENG] Based on database-assisted retrosynthetic analysis, students are able to propose multi-step synthesis sequences for complex organic compounds, especially for natural and active ingredients.

### **Enzyme Catalysis and Enzyme Engineering**

[DEU] Die Studierenden kennen verschiedene genetische und bioinformatische Methoden zur gezielten Veränderung Enzym-spezifischer Eigenschaften. Sie sind in der Lage – ausgehend von der Aminosäuresequenz eines Enzyms – geeignete Mutationen mithilfe digitaler Werkzeuge vorherzusagen, entsprechende Mutantenbibliotheken praktisch zu erstellen, sowie geeignete Assaysysteme zu deren Durchmusterung auszuwählen.

[ENG] The students know different genetic and bioinformatics methods for targeted adaptation of enzyme-specific characteristics via enzyme engineering. Starting from the amino acid sequence of an enzyme, they are able to predict mutational hotspots using computational tools, to generate corresponding mutant libraries, and to select suitable assay systems for library screening.

### **Fundamentals of Protein Structure Analysis**

[DEU] Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage

- Faktoren zu benennen, die zur Ausbildung stabiler dreidimensionaler Strukturen in Proteinen führen.
- Methoden und Prinzipien der zur Aufklärung von dreidimensionalen Strukturen verwendeten Methoden zu benennen.
- wesentliche Arbeitsschritte der Strukturaufklärung mit kristallografischen Methoden zu benennen und deren Hintergrund zu erklären.
- die Qualität von publizierten Proteinstrukturen zu beurteilen.
- weiterführende Experimente und Methoden zur Verwendung von struktureller Information vorzuschlagen.
- wissenschaftliche Studien mit strukturellogischem Aspekt zu planen.
- den Inhalt wissenschaftlicher Veröffentlichungen zu erschließen.
- die Qualität wissenschaftlicher Veröffentlichungen kritisch zu analysieren.
- recherchierte wissenschaftliche Inhalte zu präsentieren und zu diskutieren.
- sich inhaltlich kontrovers mit wissenschaftlichen Themen und Fragestellungen in einer Gruppendiskussion auseinanderzusetzen.

[ENG] After completing this module students will be able to

- name forces that lead to the formation of the stable three-dimensional structures of proteins.
- name methods that can be used to determine three-dimensional structures and to explain their underlying physical principles.
- name the most important steps in structure determination with crystallographic methods and to explain their background.
- judge the quality of published protein structures.
- suggest subsequent experiments that utilize the information contained in three-dimensional structures.
- plan scientific projects in the field of structural biology.
- grasp the content of scientific publications in the field of structural biology.
- critically analyze the content of scientific publications in the field of structural biology.
- search, present and discuss relevant scientific content.
- contribute to controversial discussions of scientific topics.

### **Biomolecular Modelling**

[DEU] Die Studierenden sind mit modernen Methoden zur Modellierung der Struktur von Biomakromolekülen sowie zur Simulation von deren thermodynamischer Eigenschaften vertraut. Sie kennen empirische Kraftfeldmethoden, Methoden zur Durchführung von Molekulardynamik-Simulationen sowie moderne Multiskalen-Simulationen. Die Studierenden sind in der Lage, die Reichweite und Grenzen dieser Methoden zu bewerten, für eigene Forschungsprojekte geeignete Methoden auszuwählen und selbstständig Molekulardynamiksimulationen durchzuführen, zu analysieren und zu bewerten.

[ENG] The students are familiar with modern methods for modelling the structure of biomacromolecules and for simulating their thermodynamic properties. They know empirical force field methods, methods for performing molecular dynamics simulations, as well as modern multiscala simulation methods. The students are able to judge the applicability and the limitations of such methods, to choose suitable simulation methods for their own research projects and to perform, analyze, and evaluate molecular dynamics simulations.

### ***Advanced Theoretical Chemistry***

[DEU] Die Studierenden besitzen Kenntnisse moderner quantenchemischer Rechenverfahren. Sie sind mit den theoretischen Grundlagen zentraler Methoden vertraut und haben einen Überblick über die verschiedenen gängigen quantenchemischen Methoden, ihre praktischen Implementierungen in wissenschaftlicher Software und ihre Anwendungsbereiche. Sie sind in der Lage, die Reichweite und Grenzen der verschiedenen Methoden selbstständig zu beurteilen und sind befähigt für eigene Forschungsprojekte geeignete Methoden auszuwählen und selbstständig quantenchemische Berechnungen durchzuführen, zu analysieren und zu bewerten.

[ENG] The students have acquired knowledge on modern methods of quantum chemistry. They are familiar with the foundations of important methods and possess an overview of commonly used quantum-chemical methods, their implementation in scientific software, and their use in chemistry. They are able to judge the applicability and the limits of different quantum-chemical methods and to use choose suitable methods for their own research projects, to perform quantum-chemical calculations and to analyse, evaluate, and assess their results.

### ***Machine Learning in Computational Chemistry***

[DEU] Die Studierenden besitzen Kenntnisse moderner Methoden des molekularen maschinellen Lernens und der molekularen künstlichen Intelligenz. Sie sind mit den theoretischen Grundlagen zentraler Methoden vertraut und haben einen Überblick über die verschiedenen gängigen Methoden, ihre Implementierungen und ihre Anwendungsbereiche. Sie sind in der Lage, die Reichweite und Grenzen der verschiedenen Methoden selbstständig zu beurteilen und sind befähigt für eigene Forschungsprojekte geeignete Methoden auszuwählen und selbstständig anzuwenden sowie die Ergebnisse zu analysieren und zu bewerten.

[ENG] The students have acquired knowledge on modern methods of molecular machine learning and molecular artificial intelligence. They are familiar with the foundations of important methods and possess an overview of commonly used methods, their implementation, and their use in chemistry. They are able to judge the applicability and the limits of different methods and to use choose and apply suitable methods for their own research projects and to analyse, evaluate, and assess their results.

### ***Research Lab "Chemical Synthesis and Drug Design"***

[DEU] Die Studierenden sind in der Lage, eigenständig eine wissenschaftliche Fragestellung auf dem Gebiet „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ zu bearbeiten und dabei ihre Kompetenzen zu datengestützten Methoden und Methoden der künstlichen Intelligenz in einem Teilbereich „Chemical Synthesis and Drug Design“ der molekularen Wissenschaften anzuwenden. Sie beherrschen die für das jeweilige Forschungsvorhaben erforderlichen Methoden und sind in der Lage selbstständig anspruchsvolle Datenanalysen zu planen, durchzuführen, auszuwerten und zu dokumentieren. Die Studierenden überblicken die aktuelle Forschung auf einem ausgewählten Forschungsgebiet und beherrschen die entsprechenden theoretischen Grundlagen. Sie können ihre Forschungsergebnisse kompetent präsentieren und sich einer fachlichen Diskussion stellen.

[ENG] Students are able to work independently on a scientific question in the field of "Artificial Intelligence for Molecular Sciences" and apply their skills in data-based methods and methods of artificial intelligence in a sub-area "Chemical Synthesis and Drug Design" of molecular sciences. They possess advanced skills required for their research project and are able to plan, perform, analyze and document advanced data analysis. They have an overview of the current research in a selected research area and are familiar with its theoretical foundations. They are able to adequately present their research results and to engage in scientific discussions.

## **Profilbereich B „Spectroscopy and Imaging“**

### ***Molecular Spectroscopy***

[DEU] Die Studierenden verstehen das Konzept der chemischen Bindung auf quantenchemischer Basis und sind in der Lage, den Aufbau und die Struktur von Molekülen zu erklären. Sie verstehen den Einfluss von elektromagnetischen Wechselfeldern auf Atome und Moleküle und sind in der Lage selbstständig quantitative Aussagen über Absorption und Emission von Licht mithilfe von Übergangsdipolmomenten und -dichten zu machen. Sie besitzen ein vertieftes theoretisches Verständnis über die spektroskopischen Eigenschaften von Atomen und Molekülen sowie moderne spektroskopische Techniken und können deren Einsatz zur Ermittlung der Molekülstruktur planen und beurteilen.

[ENG] Students understand the concept of chemical bonding on a quantum chemical basis and are able to explain the structure of molecules. They understand the influence of alternating electromagnetic fields on atoms and molecules and are able to make independent quantitative statements about the absorption and emission of light using transition dipole moments and densities. They will have a thorough theoretical understanding of the spectroscopic properties of atoms and molecules and of modern spectroscopic techniques, and will be able to plan and evaluate their use to determine molecular structures.

### ***Biophysical Chemistry***

[DEU] Die Studierenden sind mit den Grundlagen der wichtigsten physikochemischen Methoden zur Aufklärung biomolekularer Wechselwirkungen und Strukturen vertraut und sind in der Lage zu entscheiden, mit welcher modernen oder traditionellen Methode solche biochemischen Fragestellungen am effizientesten zu beantworten sind. Sie kennen Grenzen und den Dynamikbereich dieser Methoden sowie die Bedeutung, die Struktur und Dynamik von Biomolekülen für ihre Funktion besitzen. Die Studierenden sind befähigt einzuordnen, welche Verfahren zur Untersuchung von Biomolekülen und zur Beantwortung biomolekularer Fragestellungen in den verschiedenen Umgebungen von Industrie- oder Grundlagenforschung geeignet sind.

[ENG] The students know the basics of the most important physicochemical methods for the elucidation of biomolecular interactions and structures and are able to decide which modern or traditional method is most efficient to answer such biochemical questions. They know the limitations and dynamic range of these methods and the importance of structure and dynamics of biomolecules for their function. Students will be able to classify which methods are suitable for studying biomolecules and answering biomolecular questions in the different environments of industrial or basic research.

### ***Modern Optical Methods and Imaging***

[DEU] Optische Methoden sind von enormer Bedeutung zur Visualisierung von Biomolekülen, ihrer Strukturen und Dynamiken. Andererseits entwickeln sich diese Methoden in den letzten Jahren rasant. Die Studenten erwerben grundlegende Kenntnisse der physikalischen Hintergründe moderner optischer Methoden im Bereich der Biowissenschaften zur Bildgebung und zum Studium molekularer Interaktionen. Darüber hinaus wird forschungsnah der neueste Stand der Methoden dargestellt, um die Studenten in die Lage zu versetzen, die optimalen Methoden für ihre Fragestellungen auszuwählen.

[ENG] Optical methods are of enormous importance for the visualization of biomolecules, their structures and dynamics. On the other hand, these methods have been developing rapidly in recent years. Students acquire fundamental knowledge of the physical background of modern optical methods in the field of biosciences for imaging and the study of molecular interactions. In addition, the latest research-related methods are presented to enable students to select the optimal methods for their research questions.

### ***Solar and Chemical Energy Conversion***

[DEU] Die Studierenden werden befähigt, aktuelle Forschungs- und Anwendungsbereiche der solaren und chemischen Energiekonversion zu verstehen und kompetent zu diskutieren. Sie werden weiterhin befähigt, die Wechselwirkungen und Synergien der vertretenen Themen zu erkennen und interdisziplinäre Bezüge zu knüpfen. Die Studierenden sind schließlich in der Lage, im Bereich der solaren und chemischen Energiekonversion wissenschaftliche Publikationen zu lesen und dort beschriebene Experimente bzw. Berechnungen einzuordnen und zu bewerten.

[ENG] Students are able to understand and competently discuss current research and application areas of solar and chemical energy conversion. They will further be able to recognize the interactions and synergies of the topics represented and to establish interdisciplinary references. Finally, the students are able to read scientific publications in the field of solar and chemical energy conversion and to classify and evaluate experiments and calculations described therein.

### ***Physical Biology of the Cell***

[DEU] Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage

- fundamentale Größenordnungen zellulärer Prozesse zu verstehen und daraus eine eigene Intuition zu entwickeln, in welchem messbaren Rahmen sich biologische Prozesse abspielen.
- grundlegende Begriffe und Konzepte der Biophysik an zell- und molekularbiologischen Systemen zu verstehen.
- aus den erlernten quantitativen Methoden der Zellbiophysik eine interdisziplinäre Herangehensweise an spezifische experimentelle Probleme zu entwickeln.
- sich intensiv mit Datenanalyse bis hin zur Generierung von Computermodellen zu beschäftigen.
- quantitative Methoden an zellbiologischen Präparaten anzuwenden, Strukturen und Kinetiken zu analysieren und basierend auf biophysikalischen Modellen Vorhersagen zu treffen.



- die Funktion von spezifischen zellulären Komponenten zu messen und zu analysieren.
- eigene Ergebnisse zu dokumentieren, zu analysieren und kritisch zu diskutieren.

[ENG] After completing the module, students will be able to

- understand fundamental orders of magnitude of cellular processes and from this develop their own intuition towards the measurable framework in which biological processes take place.
- understand basic terms and concepts of biophysics in cellular and molecular biological systems.
- develop interdisciplinary approaches to specific experimental problems from the quantitative methods learned in cell biophysics.
- deal intensively with data analysis up to the generation of computer models. Apply quantitative methods to cell biological preparations, analyze structures and kinetics and make predictions based on biophysical models.
- measure and analyze the function of specific cellular components.
- document, analyze and critically discuss their own results.

### ***Sophisticated Imaging***

[DEU] Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage

- grundlegende und fortgeschrittene Kenntnisse im Bereich der modernen Lichtmikroskopie (LM)
- Fluoreszenzmikroskopie, Photomanipulation und der Elektronenmikroskopie (EM) für ihre wissenschaftlichen Fragestellungen anzuwenden.
- zu verstehen, welche relevanten Fragestellungen sie in den Lebenswissenschaften mit welchem Bildgebungs- bzw. Analyseverfahren am besten bearbeiten können.
- Vor- und Nachteile einer Methode erkennen und einschätzen zu können.
- zu erkennen, welche neuen Erkenntnisse man gewinnen kann, wenn man Bildgebungsverfahren mit unterschiedlichen Auflösungs- und Vergrößerungsbereichen miteinander (Technologie-übergreifend) verbindet (korrelative Mikroskopie).
- recherchierte wissenschaftliche Inhalte zu präsentieren und zu diskutieren.
- sich inhaltlich kontrovers mit wissenschaftlichen Themen und Fragestellungen in einer Gruppendiskussion auseinanderzusetzen.

[ENG] After completing the module, students will be able to

- apply basic and advanced knowledge of modern light microscopy (LM), fluorescence microscopy, photomanipulation and electron microscopy (EM) to their scientific questions.
- understand which relevant questions in the life sciences they can best work on with which imaging or analysis method.
- recognize and assess the advantages and disadvantages of a method.
- recognize what new insights can be gained by combining imaging methods with different resolution and magnification ranges (cross-technology) (correlative microscopy).
- present and discuss scientific content.
- engage controversially with scientific topics and issues in a group discussion.

### ***Chemometrics***

[DEU] Kenntnis, Verständnis und Anwendung chemometrischer Verfahren mit Bezug zum Pharmaingenieurwesen. Kritische Bewertung der Leistungsfähigkeit chemometrischer Methoden in der Praxis.

[ENG] Knowledge, understanding and application of chemometric methods to pharmaceutical engineering. Critical evaluation of the performance of chemometric methods in practice.

### ***Theoretical Spectroscopy***

[DEU] Die Studierenden besitzen Kenntnisse der zeitabhängigen Quantenmechanik sowie moderner Rechenverfahren der theoretischen Spektroskopie. Sie sind mit den theoretischen Grundlagen zentraler Methoden vertraut und haben einen Überblick über die verschiedenen gängigen quantenchemischen Methoden der theoretischen Spektroskopie, ihre praktischen Implementierungen in wissenschaftlicher Software und ihre Anwendungsbereiche. Sie sind in der Lage, die Reichweite und Grenzen der verschiedenen Methoden selbstständig zu beurteilen und sind befähigt für eigene Forschungsprojekte geeignete Methoden auszuwählen und selbstständig Berechnungen durchzuführen, zu analysieren und zu bewerten.

[ENG] The students have acquired knowledge in time-dependent quantum mechanics and on modern methods of theoretical spectroscopy. They are familiar with the foundations of important methods and possess an overview of commonly used quantum-chemical methods in theoretical spectroscopy, their implementation in scientific software, and their use in chemistry. They are able to judge the applicability and the limits of different methods and to use

choose suitable methods for their own research projects, to perform calculations and to analyse, evaluate, and assess their results.

### **Research Lab "Spectroscopy and Imaging"**

[DEU] Die Studierenden sind in der Lage, eigenständig eine wissenschaftliche Fragestellung auf dem Gebiet „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ zu bearbeiten und dabei ihre Kompetenzen zu datengestützten Methoden und Methoden der künstlichen Intelligenz in einem Teilbereich „Spectroscopy and Imaging“ der molekularen Wissenschaften anzuwenden. Sie beherrschen die für das jeweilige Forschungsvorhaben erforderlichen Methoden und sind in der Lage selbständig anspruchsvolle Datenanalysen zu planen, durchzuführen, auszuwerten und zu dokumentieren. Die Studierenden überblicken die aktuelle Forschung auf einem ausgewählten Forschungsgebiet und beherrschen die entsprechenden theoretischen Grundlagen. Sie können ihre Forschungsergebnisse kompetent präsentieren und sich einer fachlichen Diskussion stellen.

[ENG] Students are able to work independently on a scientific question in the field of "Artificial Intelligence for Molecular Sciences" and apply their skills in data-based methods and methods of artificial intelligence in a sub-area "Spectroscopy and Imaging" of molecular sciences. They possess advanced skills required for their research project and are able to plan, perform, analyze and document advanced data analysis. They have an overview of the current research in a selected research area and are familiar with its theoretical foundations. They are able to adequately present their research results and to engage in scientific discussions.

## **Profilbereich C „Data-Driven Biology“**

### ***Molecular Microbial Evolution and Diversity***

[DEU] Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage:

- die kulturunabhängige Erfassung und Analyse funktioneller Diversität (u.a. durch Feldmethoden) von Mikroorganismen im ökologischen Kontext zu interpretieren.
- eigene bakterielle Isolate in Reinkultur zu bringen, deren 16S rRNA Gen Sequenz zu bestimmen und taxonomisch einzuordnen.
- bioinformatisch die Abschätzung mikrobieller Diversität anhand eines Illumina Hochdurchsatzdatensatzes von 16S rRNA Gensequenzen durchzuführen.
- Bakterien physiologisch und chemotaxonomisch experimentell zu charakterisieren.
- phylogenetische Analysen durchzuführen und korrekt zu interpretieren.
- morphologische, physiologische und phylogenetische Diversität im Kontext zu Genomsequenzen zu analysieren.
- eine Abschätzung von Mutationsraten anhand eines Fluktuationstestes durchzuführen und deren Ergebnisse populationsgenetisch zu bewerten.
- die Rolle akzessorischer Gene unter natürlichen Bedingungen (Plasmidcuring, Konkurrenzexperiment) zu analysieren.
- heterogene Daten aus eigenen Experimenten, Literaturrecherche und bioinformatischen Analyse zu einem übergeordneten Ergebnis zu integrieren.
- die resultierende Datenintegration im Kontext wissenschaftlichen Kenntnisstandes zu diskutieren und zu dokumentieren.

[ENG] After completing the module, students are able to

- determining and interpreting microbial diversity based on high throughput sequence datasets.
- analyzing microbial functional diversity by culture-independent approaches (including field methods).
- cultivating and isolating bacterial strains from complex communities, determining their 16S rRNA gene sequences and evaluating the taxonomy of the isolates.
- characterizing bacterial isolates by physiological and chemotaxonomical methods.
- conducting phylogenetic analyses and interpreting their results.
- interpreting morphological, physiological, and phylogenetic diversity in the context of existing information from genome sequence.
- quantifying mutation rates and interpret their implications for bacterial evolution.
- elucidating the role of accessory genes under natural conditions (by plasmid curing, competition experiments).
- integrating heterogenous datasets from own experiments, literature searches and bioinformatic analysis.
- contextualize the integrated data considering the actual state of scientific knowledge.

## **Immunometabolism**

[DEU] Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage

- die Bedeutung des Stoffwechsels von Immunzellen während einer Infektion/Inflammation zu erläutern.
- moderne analytische Techniken wie Isotopen Markierung, Massenspektrometrie und metabolische Flussanalyse anzuwenden.
- GC-MS Daten auszuwerten und zu interpretieren.
- den Energiestoffwechsel mit Hilfe von Respirationmessungen zu interpretieren.
- Konzepte zu entwickeln um systembiologische Fragestellungen mit Hilfe von verschiedenen Methoden zu beantworten.
- recherchierte wissenschaftliche Inhalte zu präsentieren und zu diskutieren.
- sich inhaltlich kontrovers mit wissenschaftlichen Themen und Fragestellungen in einer Gruppendiskussion auseinanderzusetzen.

[ENG] After completing the module, students are able to

- explain the importance of the metabolism of immune cells during infection/inflammation.
- apply modern analytical techniques, such as isotope labelling, mass spectrometry and metabolic flux analysis - evaluate and interpret GC-MS data.
- interpret the energy metabolism by means of respiration measurements.
- develop concepts for solving systems biology problems with the help of different methods.
- present and discuss scientific work.
- discuss controversial scientific topics and questions.

## **Comparable Quantitative Measurements and Metabolomics Biomarker Signature to Predict Case and Control**

[DEU] Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage

- einfache Cross-over Interventionsstudien durchzuführen und Proben zu entnehmen.
- Metabolomanalysen in humanen Speichel- und Blutproben durchzuführen und massenspektrometrisch zu messen.
- die gemessenen Rohdaten bioinformatisch zu analysieren und daraus quantitative und semiquantitative Metabolitmengen abzuleiten.
- die Daten mit Algorithmen des maschinellen Lernens (logistische Regression, neuronale Netze) auf Biomarkersignaturen zu untersuchen.
- ausgewählte Biomarker Metabolite mit hoher Präzision und Reproduzierbarkeit zu messen.
- grundlegende Konzepte der Metrologie und Standardisierung anzuwenden.
- statistische Analysen in R durchzuführen.
- die Bedeutung der Standardisierung für die Durchführung von Experimenten zu erkennen.
- die Bedeutung des Konzepts von klinischen Cross-over Interventionsstudien für die Bewertung von Medikamenten zu verstehen.

[ENG] After completing the module, students are able to

- perform a simple crossover intervention study and collect samples.
- perform metabolome analyses of human saliva and/or blood samples by mass spectrometry.
- analyze the raw data with the help of bioinformatics to determine quantitative and semi-quantitative metabolite concentrations.
- identify biomarker signatures by application of machine learning algorithms (logistic regression, lasso (least absolute shrinkage and selection operator)).
- quantify selected biomarkers with high precision and reproducibility.
- apply basic concepts of metrology and standardization.
- perform statistical analyses in R.
- understand the relevance of standardization for experimental design and performance.
- understand the concept of a clinical crossover study / trial to evaluate the efficacy or effects of a drug.

## **Network Biology**

[DEU] Nach erfolgreichem Abschluss dieses Moduls besitzen die Studierenden ein Grundlegendes Verständnis der Graphentheorie und ihren Anwendungen bei der Auswertung biomedizinischer Daten. Sie können Werkzeuge der Netzwerkbiologie verwenden sowie Netzwerkanalysen fundiert bewerten und sind prinzipiell in der Lage neue Graph-basierte Methoden zur Auswertung biomedizinischer Daten zu entwickeln.

[ENG] After successful completion of this module, students will have a basic understanding of graph theory and its applications for the analysis of biomedical data. They will be able to use network biology tools and critically assess network analyses. They will be capable to devise new graph-based strategies for the analysis of biomedical data.

## ***Molecular Phylogenetics and Taxonomy***

[DEU] Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage

- DNA nach der Sanger-Methode zu sequenzieren sowie die Sequenz-Chromatogramme zu überprüfen und zu alignieren.
- methodische Grundlagen der Systematik und phylogenetischen Rekonstruktion mittels hauptsächlich molekularer Merkmale zu erklären und nachzuvollziehen.
- grundlegende Prinzipien der phylogenetischen Analyse (Maximum Parsimony, Bayesian Inference und andere Methoden) theoretisch nachzuvollziehen und entsprechende bioinformatische Software praktisch anzuwenden.
- DNA-Datenbanken zu durchsuchen und zum Vergleich von Sequenzen zu nutzen (BLAST).
- eigenständig ein Forschungsprojekt durchzuführen, von der Organisation der praktischen Laborarbeit bis zur Dokumentation, bioinformatischen Datenanalyse, Interpretation und Präsentation der Ergebnisse.

[ENG] After completing the module, students will be able to

- sequence DNA using the Sanger method and review and align sequence chromatograms.
- explain and understand the methodological foundations of systematics and phylogenetic reconstruction primarily using molecular features.
- theoretically understand the basic principles of phylogenetic analysis (Maximum Parsimony, Maximum Likelihood, Bayesian Inference, and other methods) and practically apply relevant bioinformatic software.
- search DNA databases and use them for sequence comparison (BLAST).
- conceptually and practically delimit species based on molecular genetic evidence.
- independently conduct a research project, from organizing practical laboratory work to documenting data, bioinformatic analysis, interpretation, and presenting the results.

## ***Data Literacy and Genome Research***

[DEU] Nach Abschluss dieses Moduls werden die Studierenden in der Lage sein

- Online-Ressourcen zu nutzen, um genomische Informationen zu finden und abzurufen.
- mit verschiedenen biologischen Datenbanken und Datentypen zu arbeiten.
- ihr eigenes Sequenzierprojekt und ihren Arbeitsablauf zu planen.
- das für die Nanopore-Sequenzierung benötigte genetische Material zu extrahieren.
- führen Long-Read-Sequenzierungen mit einem tragbaren MinION durchzuführen.
- in einem Terminal auf Linux-Betriebssystemen zu arbeiten.
- Bioinformatik-Tools zu installieren.
- die neuesten Bioinformatik-Tools für Long-Read-Analysen zu nutzen.
- Big Data zu analysieren und zu visualisieren.
- in einer Cloud-basierten Umgebung zu arbeiten.
- interpretieren die Ergebnisse kritisch und fassen sie in einem wissenschaftlichen Bericht zusammen.
- im Rahmen eines Peer-Review-Verfahrens konstruktive Kritik auszuüben.
- einen wissenschaftlichen Vortrag vor einem internationalen Publikum zu halten.
- die Ergebnisse eines Big-Data-Projekts an verschiedene Zielgruppen zu kommunizieren.

[ENG] After completing this module students will be able to

- use online resources to find and retrieve genomic information.
- work with different biological databases and data types.
- plan their own sequencing project and workflow.
- extract the genetic material needed for nanopore sequencing.
- perform long read sequencing using a portable MinION.
- work in a terminal on Linux operating systems.
- install bioinformatics tools.
- utilize latest bioinformatic tools for long read analyses.
- analyse and visualise big data.
- work in a cloud-based environment.
- critically interpret the results and summarize these in a scientific report.
- give constructive criticism during of a peer-review process.
- give a scientific talk in front of an international audience.
- communicate the results of a big data project to different target audiences.

## ***Applied Plant Transcriptomics***

[DEU] Nach Abschluss dieses Moduls sind die Studierenden in der Lage

- Experimente zur Analyse der Genexpression zu entwickeln.
- de novo Transkriptomassemblies zu generieren.
- Qualitätskontrollen für RNA-Seq-Datensätze durchzuführen.
- Genexpression basierend auf RNA-Seq-Daten zu analysieren.
- eine funktionale Annotation für ein Set von Sequenzen zu erstellen.
- Heatmaps und Grafiken mittels R zu erstellen.
- phylogenetische Bäume zu erstellen.
- die Ergebnisse eines RNA-Seq-Experimentes zu interpretieren.
- fehlerhafte Analysen in Publikationen zu erkennen.
- recherchierte wissenschaftliche Inhalte zu präsentieren und zu diskutieren.
- sich inhaltlich kontrovers mit wissenschaftlichen Themen und Fragestellungen in einer Gruppendiskussion auseinanderzusetzen.

[ENG] After completing this module students are able to

- design experiments to study gene expression and
- conduct de novo transcriptome assembly.
- perform a quality control on RNA-seq data sets.
- analyze gene expression based on RNA-seq.
- perform functional annotations with the application of transcriptome annotation tools.
- create heatmaps and graphs using R.
- create phylogenetic trees.
- interpret the results of RNA-seq experiments.
- recognize flawed publications.
- to present and discuss scientific publications.
- to address controversial scientific topics and questions

## ***Functional Genomics in Infection Biology***

[DEU] Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage

- die Konzepte der Funktionellen Genomforschung vertiefend zu verstehen. Dabei sollen insbesondere die Möglichkeiten und Grenzen molekulargenetischer Methoden und OMICs-Technologien sowohl in der Grundlagen- und angewandten Forschung als auch in der medizinischen Diagnostik erkannt werden.
- ein breites Spektrum von Arbeitsmethoden der Infektionsgenetik und funktionellen Genomforschung zum Studium von Wirt-Pathogen-Interaktionen anzuwenden.
- Experimenten zur umfassenden Beantwortung einer wissenschaftlichen Fragestellung zu konzipieren.
- sich kritische mit den Vor- und Nachteilen einer Methode und den erhaltenen Ergebnissen auseinanderzusetzen.
- Ergebnisse in einen wissenschaftlichen Kontext einzuordnen.
- recherchierte wissenschaftliche Inhalte zu präsentieren und zu diskutieren.
- sich inhaltlich kontrovers mit wissenschaftlichen Themen und Fragestellungen in einer Gruppendiskussion auseinanderzusetzen.

[ENG] After completing this module students are able to

- understand the concepts of functional genomics. In particular, they will be able to recognise the potential and limitations of molecular genetic methods and OMICs technologies in basic and applied research and medical diagnostics.
- apply a wide range of infection genetics and functional genomics techniques to study host-pathogen interactions.
- design experiments to comprehensively answer a scientific question.
- critically analyse the advantages and disadvantages of a method and the results obtained.
- place results in a scientific context.
- present and discuss researched scientific content.
- discuss controversial scientific topics and issues in a group discussion.

## ***Microbial Proteomics***

[DEU] Nach Abschluss des Moduls sind die Studierenden in der Lage

- die Grundprinzipien der Methoden der Proteomik zu beschreiben und Vor- und Nachteile der Methoden kritisch zu bewerten.
- Proteine aus komplexen Proteingemischen zu identifizieren und zu quantifizieren.

- umfangreiche Datensätze zu analysieren und die erhaltenen Ergebnisse visuell darzustellen.
- Konzeption von Experimenten zur umfassenden Beantwortung einer wissenschaftlichen Fragestellung.
- kritische Auseinandersetzung mit den Vor- und Nachteilen einer Methode und den erhaltenen Ergebnissen.
- Einordnung von Ergebnissen in einen wissenschaftlichen Kontext.
- recherchierte wissenschaftliche Inhalte zu präsentieren und zu diskutieren.
- sich inhaltlich kontrovers mit wissenschaftlichen Themen und Fragestellungen in einer Gruppendiskussion auseinanderzusetzen.

[ENG] After completing the module, students are able to

- describe the basic principles of proteomic methods and critically evaluate the advantages and disadvantages of the methods.
- identify and quantify proteins from complex protein mixtures.
- analyse large data sets and visualise the results.
- design experiments to comprehensively answer a scientific question.
- critically analyse the advantages and disadvantages of a method and the results obtained.
- place results in a scientific context.
- present and discuss researched scientific content.
- discuss controversial scientific issues in a group.

### **Research Lab “Data-Driven Biology”**

[DEU] Die Studierenden sind in der Lage, eigenständig eine wissenschaftliche Fragestellung auf dem Gebiet „Artificial Intelligence for Molecular Sciences“ zu bearbeiten und dabei ihre Kompetenzen zu datengestützten Methoden und Methoden der künstlichen Intelligenz in einem Teilbereich „Data-Driven Biology“ der molekularen Wissenschaften anzuwenden. Sie beherrschen die für das jeweilige Forschungsvorhaben erforderlichen Methoden und sind in der Lage selbständig anspruchsvolle Datenanalysen zu planen, durchzuführen, auszuwerten und zu dokumentieren. Die Studierenden überblicken die aktuelle Forschung auf einem ausgewählten Forschungsgebiet und beherrschen die entsprechenden theoretischen Grundlagen. Sie können ihre Forschungsergebnisse kompetent präsentieren und sich einer fachlichen Diskussion stellen.

[ENG] Students are able to work independently on a scientific question in the field of "Artificial Intelligence for Molecular Sciences" and apply their skills in data-based methods and methods of artificial intelligence in a sub-area "Data-Driven Biology" of molecular sciences. They possess advanced skills required for their research project and are able to plan, perform, analyze and document advanced data analysis. They have an overview of the current research in a selected research area and are familiar with its theoretical foundations. They are able to adequately present their research results and to engage in scientific discussions.

## **Schlüsselqualifikationsbereich**

### ***Ethics and Epistemology***

[DEU] Der Kurs:

- bietet einen philosophischen Rahmen und einen moralischen Kompass für die Urteilsbildung der Studierenden in Bezug auf die Datenwissenschaft und deren Anwendungen (künstliche Intelligenz, Robotik, etc.).
- zielt darauf ab, Kommunikationsfähigkeiten, soziale und bürgerliche Kompetenzen zu entwickeln.
- versichert die Studierenden über die Grenzen von Maschinen, Maschineneinstellungen und Maschinenethik.
- stärkt die Persönlichkeitsentwicklung im Lichte der Digitalisierung und der damit verbundenen Ansprüche an den gesellschaftlichen Wandel.

Die Studierenden sind in der Lage, gesellschaftliche und technische Probleme der Technik und Informationsverarbeitung auf der Grundlage klassischer und neuerer Positionen der theoretischen und praktischen Philosophie zu erkennen und zu interpretieren. Sie sind in der Lage, diese Probleme ethisch zu interpretieren und ihre Position mit Argumenten aus der Maschinenethik zu untermauern.

[ENG] The course:

- provides a philosophical framework and moral compass for guiding the judgement of students regarding data science and its applications (artificial intelligence, robotics, etc.).
- aims to develop communication skills, social and civic competences.
- reassures students on the limits of machines, machinery settings and machine ethics.
- strengthens personal development in the light of digit(al)ization and related claims of social change.

The students will be able to recognize and interpret social and technical problems in technology and information processing based in classical and recent position in theoretical and practical philosophy. They will be able to interpret these problems ethically and support their position with arguments from machine ethics.

### **Key Qualifications**

[DEU] Die Qualifikationsziele der überfachlichen Veranstaltungen des Professionalisierungsbereiches gliedert sich in drei Teilbereiche:

#### *Übergeordneter Bezug: Einbettung des Studienfaches*

Die Studierenden werden befähigt, ihr Studienfach in gesellschaftliche, historische, rechtliche oder berufsorientierende Bezüge einzuordnen (je nach Schwerpunkt der Veranstaltung). Sie sind in der Lage, übergeordnete fachliche Verbindungen und deren Bedeutung zu erkennen, zu analysieren und zu bewerten. Die Studenten erwerben einen Einblick in Vernetzungsmöglichkeiten des Studienfaches und Anwendungsbezüge ihres Studienfaches im Berufsleben.

#### *Wissenschaftskulturen*

Die Studierenden lernen Theorien und Methoden anderer, fachfremder Wissenschaftskulturen kennen, lernen sich interdisziplinär mit Studierenden aus fachfremden Studiengebieten auseinanderzusetzen und zu arbeiten, können aktuelle Kontroversen aus einzelnen Fachwissenschaften diskutieren und bewerten, erkennen die Bedeutung kultureller Rahmenbedingungen auf verschiedene Wissenschaftsverständnisse und Anwendungen, kennen die genderbezogenen Sichtweisen auf verschiedenen Fachgebieten und die Auswirkung von Geschlechterdifferenzen, und können sich intensiv mit Anwendungsbeispielen aus fremden Fachwissenschaften auseinandersetzen.

#### *Handlungsorientierte Angebote*

Die Studierenden werden befähigt, theoretische Kenntnisse handlungsorientiert umzusetzen. Sie erwerben verfahrensorientiertes Wissen (Wissen über Verfahren und Handlungsweisen, Anwendungskriterien bestimmter Verfahrens- und Handlungsweisen) sowie metakognitives Wissen (u.a. Wissen über eigene Stärken und Schwächen).

Je nach Veranstaltungsschwerpunkt erwerben die Studierenden unter anderem die Fähigkeit

- Wissen zu vermitteln bzw. Vermittlungstechniken anzuwenden,
- Gespräche und Verhandlungen effektiv zu führen, sich selbst zu reflektieren und adäquat zu bewerten,
- kooperativ im Team zu arbeiten, Konflikte zu bewältigen,
- Teams zu führen,
- Informations- und Kommunikationsmedien zu bedienen oder
- sich in einer anderen Sprache auszudrücken.

Durch die handlungsorientierten Angebote sind die Studierenden in der Lage, in anderen Bereichen erworbenes Wissen effektiver einzusetzen, die Zusammenarbeit mit anderen Personen einfacher und konstruktiver zu gestalten und somit Neuerwerb und Neuentwicklung von Wissen zu erleichtern. Sie erwerben Schlüsselqualifikationen, die ihnen den Eintritt in das Berufsleben erleichtern und in allen beruflichen Situationen zum Erfolg beitragen.

[ENG] The learning outcomes of the interdisciplinary courses related to key qualifications are divided into three sub-areas:

#### *Overarching reference: Embedding the subject of study*

Students are enabled to embed their subject of study in social, historical, legal or professional contexts (depending on the focus of the course). They are able to recognize, analyze and evaluate overarching subject-related connections and their significance. The students gain an insight into the networking possibilities of the subject and application possibilities of their field of study in professional life.

#### *Scientific cultures*

Students become familiar with the theories and methods of other scientific cultures, learn to deal and work interdisciplinarily with students from other fields of study, can discuss and evaluate current controversies from individual disciplines, recognize the importance of cultural framework conditions for different scientific understandings and applications, know gender-related perspectives on different subject areas and the effects of gender differences, and can deal intensively with application examples from foreign disciplines.

#### *Action-oriented courses*

Students are enabled to apply theoretical knowledge in an action-oriented manner. They acquire procedural knowledge (knowledge of procedures and courses of action, application criteria for certain procedures and courses of action) as well as metacognitive knowledge (including knowledge of their own strengths and weaknesses).

Depending on the focus of the course, students acquire the ability to

- impart knowledge and apply communication techniques,
- conduct discussions and negotiations effectively, reflect on themselves and evaluate themselves appropriately,
- work cooperatively in a team, manage conflicts,
- lead teams,
- use information and communication media or
- express themselves in another language.

The action-oriented courses enable students to use knowledge acquired in other areas more effectively, to work more easily and constructively with other people and thus to facilitate the acquisition and development of new knowledge. They acquire key qualifications that facilitate their entry into professional life and contribute to success in all professional situations.

## **Masterarbeit**

### ***Master's Thesis in AIMS***

[DEU] Die Studierenden sind in der Lage, innerhalb einer vorgegebenen Frist eine wissenschaftliche Fragestellung aus einem Teilbereich der "Artificial Intelligence for Molecular Sciences" selbstständig zu bearbeiten sowie die erhaltenen Forschungsergebnisse in geeigneter schriftlicher Form darzustellen. Sie sind mit den jeweiligen fachlichen Gepflogenheiten vertraut und besitzen einen Einblick in die aktuelle Forschung.

[ENG] Students are able to work independently on a scientific question from a sub-field of "Artificial Intelligence for Molecular Sciences" within a specified period of time and to present their research results adequately in written form. They are familiar with the relevant conventions of their field of research and have an insight into current topics of research.



## **Anlage 4 – Übersicht der Module inkl. Studienleistungen, Prüfungen und Leistungspunkten**

Abkürzungen:

LP – Leistungspunkt(e)
PL – Prüfungsleistung
SL – Studienleistung
Kl. – Klausur (APO §9a)
Kl.+ – Klausur+ (APO §9j)
MP – Mündliche Prüfung (APO §9b)
MP+ – Mündliche Prüfung+ (APO §9k)
Referat – Referat (APO §9f) inkl. schriftlicher Ausarbeitung
CompProg – Erstellung und Dokumentation eines Computer- bzw. Softwareprogramms (APO §9g)
StA – Studienarbeit inkl. schriftlicher Ausarbeitung und Präsentation (APO §9l)
ÜbA – Bearbeitung von Übungsaufgaben bzw. Hausaufgaben (§ 5 Absatz 1 Buchst. b)
Protokoll – Protokoll (§5 Absatz 1 Buchst. c)
LabJ – Laborjournal (§5 Absatz 1 Buchst. d)
expA – Experimentelle Arbeit (APO §9h)
expA inkl. Koll. – Experimentelle Arbeit inkl. Kolloquien (§ 5 Absatz 1 Buchst. a)

<sup>(AP)</sup> In den mit (AP) gekennzeichneten Modulen besteht Anwesenheitspflicht in den zugehörigen Praktika und praktikumsvorbereitenden Seminaren (siehe § 7 Absatz 2).

### **Grundlagenbereich (Pflichtbereich)**

Modul	Studienleistungen	Prüfungsleistungen	LP
AM-P-1 Introduction to AIMS	Referat		5
AM-P-2 Mathematics for Engineers A		Kl. (180 Min)	8
AM-P-3 Programming in Python and Python Lab <sup>(AP)</sup>	CompProg		8
AM-P-4 Scientific Software Engineering – Lab <sup>(AP)</sup>	ÜbA	Kl. (120 Min) oder MP (30 Min)	5

### **Vertiefungsbereich (Wahlpflichtbereich)**

Modul	Studienleistungen	Prüfungsleistungen	LP
AM-V-1 Introduction to Machine Learning		Kl. (90 Min) oder MP (30 Min)	5
AM-V-2 Pattern Recognition		Kl. (90 Min) oder MP (30 Min)	5
AM-V-3 Computer Lab Pattern Recognition <sup>(AP)</sup>		CompProg	5
AM-V-4 Deep Learning Lab <sup>(AP)</sup>	ÜbA Referat		5
AM-V-5 Methods of Uncertainty Analysis and Quantification		Kl. (90 Min) oder MP (30 Min)	5

### **Profilbereich A „Chemical Synthesis and Drug Design“ (Wahlpflichtbereich)**

Modul	Studienleistungen	Prüfungsleistungen	LP
AM-A-1 Reaction Mechanisms		Kl. oder MP	4
AM-A-2 Organometallic Chemistry		Kl. oder MP	4
AM-A-3 Catalysis <sup>(AP)</sup>		expA (25%) Kl. oder MP (75%)	8

Modul	Studienleistungen	Prüfungsleistungen	LP
AM-A-4 Advanced Inorganic Chemistry <sup>(AP)</sup>		Referat (25%) Kl. oder MP (75%)	8
AM-A-5 Organic Synthesis Planning		Kl. oder MP	4
AM-A-6 Enzyme Engineering <sup>(AP)</sup>	expA	Kl. oder MP	10
AM-A-7 Fundamentals of Protein Structure Analysis <sup>(AP)</sup>	expA Referat	Kl. (200 Min.)	10
AM-A-8 Biomolecular Modelling <sup>(AP)</sup>	expA (benotet)	Kl.+ oder MP+ (Berücksichtigung SL zu 30 %)	8
AM-A-9 Advanced Theoretical Chemistry <sup>(AP)</sup>	ÜbA (unbenotet) expA (benotet)	Kl.+ oder MP+ (Berücksichtigung SL ÜbA zu 20 %; SL expA. zu 20 %)	8
AM-A-10 Machine Learning in Computational Chemistry <sup>(AP)</sup>	ÜbA (unbenotet) expA (benotet)	Kl.+ oder MP+ (Berücksichtigung SL ÜbA zu 20 %; SL expA. zu 20 %)	8
AM-A-RP Forschungspraktikum „Chemical Synthesis and Drug Design“		StA	13 – 17 <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Die Anzahl der zu erwerbenden Leistungspunkte hängt von Umfang und Dauer des Forschungspraktikums ab.

### **Profilbereich B „Spectroscopy and Imaging“ (Wahlpflichtbereich)**

Modul	Studienleistungen	Prüfungsleistungen	LP
AM-B-1 Molecular Spectroscopy	ÜbA	Kl. oder MP	5
AM-B-2 Biophysical Chemistry	ÜbA	Kl. oder MP	8
AM-B-3 Modern Optical Methods und Imaging		Kl. oder MP	8
AM-B-4 Solar and Chemical Energy Conversion <sup>(AP)</sup>	expA inkl. Koll.	Kl. (90 Min) oder MP (30 Min)	8
AM-B-5 Physical Biology of the Cell <sup>(AP)</sup>	expA	Referat	10
AM-B-6 Sophisticated Imaging <sup>(AP)</sup>	expA	Referat	10
AM-B-7 Chemometrics	Protokoll	MP (30 Min)	5
AM-B-8 Theoretical Spectroscopy <sup>(AP)</sup>	ÜbA (unbenotet) expA (benotet)	Kl.+ oder MP+ (Berücksichtigung SL ÜbA zu 20 %; SL expA. zu 20 %)	8
AM-A-10 Machine Learning in Computational Chemistry (siehe oben)			
AM-B-RP Forschungspraktikum „Spectroscopy and Imaging“		StA	12 – 16 <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Die Anzahl der zu erwerbenden Leistungspunkte hängt von Umfang und Dauer des Forschungspraktikums ab.

### Profilbereich C „Data-Driven Biology“ (Wahlpflichtbereich)

Modul	Studienleistungen	Prüfungsleistungen	LP
AM-C-1 Molecular Microbial Evolution and Diversity <sup>(AP)</sup>	expA Kl. (90 Min.)	Kl. (200 Min.)	10
AM-C-2 Immunometabolism <sup>(AP)</sup>	expA	Referat	10
AM-C-3 Comparable Quantitative Measurements and Metabolomics Biomarker Signature to Predict Case and Control <sup>(AP)</sup>	expA	Kl. (140 Min)	7
AM-C-4 Network Biology	ÜbA	Kl. oder MP	5
AM-C-5 Molecular Phylogenetics and Taxonomy <sup>(AP)</sup>	ÜbA expA inkl. LabJ Referat (30 Min)	Kl. (120 Min)	10
AM-C-6 Data Literacy and Genome Research <sup>(AP)</sup>	expA Referat (15 Min)	Kl. (200 Min)	10
AM-C-7 Applied Plant Transcriptomics <sup>(AP)</sup>	expA Referat (20 Min)	Kl. (200 Min)	10
AM-C-8 Functional Genomics in Infection Biology <sup>(AP)</sup>	expA Referat	Referat	10
AM-C-9 Microbial Proteomics <sup>(AP)</sup>	expA Referat (30 Min)	Referat (40 Min)	10
AM-C-RP Forschungspraktikum „Data-Driven Biology“		StA	12 – 17 <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Die Anzahl der zu erwerbenden Leistungspunkte hängt von Umfang und Dauer des Forschungspraktikums ab.

### Masterarbeit

Modul	Studienleistungen	Prüfungsleistungen	LP
AM-M Master's Thesis in AIMS		Siehe APO §14 und BPO §8	30

### Schlüsselqualifikationsbereich

Im Schlüsselqualifikationsbereich sind die folgenden Leistungen zu erbringen (insg. 12 LP)

(**P** = Pflicht / **W** = Wahl):

Lehrveranstaltung	Studienleistungen	LP	P/W
AM-KQ-1 Modul „Ethics and Epistemology“	Protokoll (SL) Kl. (SL, 120 Min)	5	<b>P</b>
AM-KQ-2 Professionalisierungsmodul			
Sprachkompetenz <sup>a</sup>	Kl. oder MP	bis zu 7	<b>W</b>
Berufsorientierung, Betriebspraktika <sup>b</sup>		bis zu 4	<b>W</b>
Erwerb von Sozialkompetenz, Tutorentätigkeit <sup>b</sup>		bis zu 4	<b>W</b>
Überfachliche Veranstaltungen aus den Besonderen Verzeichnissen „Ziele für Nachhaltige Entwicklung“, „Pool“ und „Gender-Lehrverzeichnis“ <sup>c</sup>	<sup>d</sup>	bis zu 7	<b>W</b>

<sup>a</sup> Kurse des Sprachenzentrums dürfen ab dem folgenden Niveau eingebracht werden:

- Sprachkurse in der zweiten und dritten Schulfremdsprache mindestens mit dem Niveau A2

- Deutsch-Sprachkurse dürfen von Bildungsausländern erst ab Niveau B1 nach vorherigen Antrag an den Prüfungsausschuss eingebracht werden  
Sprachkurse in der Muttersprache bzw. in den Amtssprachen des Heimatlandes und Englischkurse werden nicht anerkannt.

- <sup>b</sup> Zur Anerkennung sind ein Nachweis sowie ein Bericht, in dem die erworbenen überfachlichen Kompetenzen reflektiert werden, vorzulegen.
- <sup>c</sup> Weitere Leistungspunkte können in Lehrveranstaltungen erworben werden, die dem Erwerb von Schlüsselqualifikationen dienen.

Der Prüfungsausschuss kann Veranstaltungen aus den Besonderen Verzeichnissen „Ziele für Nachhaltige Entwicklung“, „Pool“ oder „Gender Lehrverzeichnis“ ausschließen oder weitere Veranstaltungen zulassen. Für die Anerkennung von anderen Lehrveranstaltungen/Modulen für den Schlüsselqualifikationsbereich muss ein schriftlicher Antrag beim Prüfungsausschuss gestellt werden.

- <sup>d</sup> Für die gewählten Lehrveranstaltungen/Module wird ein Leistungsnachweis gefordert. Ein Teilnahmechein ist nicht ausreichend. Die Prüfungsmodalitäten variieren je nach den gewählten Veranstaltungen.