

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie / chimist

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Relații structură-activitate biologică – CLM1163						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. Dr. Nagy Levente Csaba						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. Dr. Nagy Levente Csaba						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	6	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Opț

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					25
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					12
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					25
Tutoriat					4
Examinări					3
Alte activități:					—
3.7 Total ore studiu individual	69				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	5				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> Nu este cazul
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise Nu va fi acceptată întârzierea
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la laborator cu telefoanele mobile închise Temele trebuie rezolvate în mod individual de către fiecare student și se vor preda în 2 săptămâni de la primire în format electronic Calculatoarele vor fi oprite de către studenți la terminarea laboratorului

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul chimiei Identificarea aspectelor interdisciplinare cu domenii conexe chimiei (informatică, fizică, biologie) Descrierea metodelor de analiză folosite și interpretarea rezultatelor obținute Realizarea unui studiu / proiect cu caracter interdisciplinar Analiza critică a modelelor și teoriilor existente cu privire la structura și reactivitatea compușilor chimici Abilitatea de a utiliza diferitele tehnici de modelare a proprietăților fizico-chimice și biologice ale compușilor organici, precum și prelucrarea statistică a datelor Capacitatea de a utiliza noțiuni în vederea proiectării de noi compuși cu activitate biologică
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată. Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse. Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, în limba maternă, în limba română, și într-o limbă de circulație internațională.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> dobândirea cunoștințelor teoretice privind modelarea moleculară, topologie moleculară și dezvoltarea capacității de rezolvare de probleme.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Acumularea de cunoștințe teoretice de specialitate prin învățarea, înțelegerea și aplicarea conceptelor legate de chimia matematică Dezvoltarea capacității de analiză și sinteză a problemelor legate de relații structură chimică – proprietăți fizico-chimice și biologice

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Definirea domeniului. Noțiuni introductive. Relația structură-activitate. Aplicații QSAR.	Prelegerea. Explicația Conversația	2 ore
8.1.2. Informația chimică și descriptori moleculari. Conceptul de descriptor. Tipuri de descriptor.	Prelegerea. Explicația Conversația	2 ore
8.1.3. QSAR clasic. Modelul Free-Wilson. Regresii liniare simple și multiple.	Prelegerea; Explicația Conversația	2 ore
8.1.4. Reprezentarea structurii chimice prin topologie. Grafuri și matrici. Indici topologici.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2 ore
8.1.5. Chimie computațională. Analiza conformațională. Mecanica moleculară. Mecanica cuantică.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2 ore
8.1.6. Validarea modelelor QSAR.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2 ore
8.1.7. Introducere în QSAR 3D. Similaritate	Explicația; Conversația;	2 ore

moleculară. Analiza suprafețelor moleculare.	Descrierea; Problematizarea;	
8.1.8. Modele avansate QSAR.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	2 ore
8.1.9. Prezentare programe utilizate în modelare moleculară și studii QSAR.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	2 ore
8.1.10. SAR și QSAR în drug design. Exemple reprezentative.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	2 ore
8.1.11. Metode statistice în QSAR.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	2 ore
8.1.12. Andocare moleculară. Interacție receptor-ligand.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	2 ore
Bibliografie 1. M.V. Diudea, <i>Topologie moleculară</i> , Ed. Compres, 1995. 2. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, <i>Molecular topology</i> , NOVA SCIENCE, New York, 2002. 3. R. Todeschini, V. Consonni, R. Mannhold, H. Kubinyi, H. Timmerman, <i>Handbook of Molecular Descriptors</i> , Wiley-VCH, 2002. 4. K. Roy, S. Kar, R.N. Das, <i>A primer on QSAR/QSPR modeling: fundamental concepts</i> , Springer, 2015. 5. D. C. Young, <i>Computational drug design: A guide for computational and medicinal chemists</i> . Wiley, 2009.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Construirea de modele moleculare folosind programe de modelare moleculară. Minimizarea energiei.	Explicația; Problematizarea; Conversația;	4 ore
8.2.2. Construirea de matrici topologici și generarea de descriptori moleculari. Grafică moleculară.	Explicația; Problematizarea; Conversația;	4 ore
8.2.3. Similaritate moleculară. Analiză conformațională.	Explicația; Problematizarea; Conversația;	4 ore
8.2.4. Corelații liniare simple și multiple.	Explicația; Problematizarea; Conversația;	4 ore
8.2.5. Screening virtual, librării moleculare.	Explicația; Problematizarea; Conversația;	4 ore
8.2.6. Andocare moleculară.	Explicația; Problematizarea; Conversația;	4 ore
Bibliografie 1. M.V. Diudea, <i>Topologie moleculară</i> , Ed. Compres, 1995. 2. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, <i>Molecular topology</i> , NOVA SCIENCE, New York, 2002. 3. R. Todeschini, V. Consonni, R. Mannhold, H. Kubinyi, H. Timmerman, <i>Handbook of Molecular Descriptors</i> , Wiley-VCH, 2002. 4. K. Roy, S. Kar, R.N. Das, <i>A primer on QSAR/QSPR modeling: fundamental concepts</i> , Springer, 2015.		

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

<ul style="list-style-type: none"> Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina Relații structură-activitate biologică, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la curs Rezolvarea corectă a problemelor	Examen oral/practic – accesul la examen este condiționat de prezența la laborator/seminar. Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	50%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar Calitatea referatelor pregătite Activitatea desfășurată la seminar	Referat	50%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului.Cunoașterea noțiunilor introductive; întocmirea corectă a unui bilanț de materiale (identificare sistem, subsisteme, scrierea corectă a ecuațiilor de bilanț de masă); elaborarea unui flux de separare (distilare simplă); elaborarea unei diagrame cascadă pentru sinteza unui subsistem de schimbătoare de căldură.			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

25 martie 2016

Lect. Dr. Nagy Levente Csaba

Lect. Dr. Nagy Levente Csaba

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

Lect. Dr. Szabó Gabriella Stefánia