

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babes-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Chimie si Inginerie Chimica
1.3 Departamentul	Departamentul de Chimie si Inginerie Chimica-linia maghiara
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licenta
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Topologie moleculara – CLM1160						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. Dr. Gabriel Katona						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. Dr. Gabriel Katona						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	I	2.6. Tipul de evaluare	EC	2.7 Regimul disciplinei	Ob

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"> In timpul orelor de curs studentii trebuie sa fie foarte atenti, deoarece sunt prezentate cantitati semnificative de informatii, care sunt impartite si prezentate in intervale scurte de timp. Nu sunt permise alte activitati in timpul cursului. Nu sunt permise mesajele text, e-mail-urile, etc in timpul orelor de curs. Nu sunt permise înregistrările audio sau video a cursurilor. Studentii sunt rugati sa-si seteze telefoanele in modul silentios.
-------------------------------	--

5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> • Prezenta la seminar/laborator este obligatorie. • Este imperativ ca studentii sa detina abilități de utilizare a calculatorului solide. • In timpul orelor de seminar studentii trebuie sa fie foarte atenti, deoarece sunt prezentate cantitati semnificative de informatii, care sunt impartite si prezentate in intervale scurte de timp. • Prezentarea temelor de seminar este obligatorie. • Nu sunt permise alte activitati in timpul seminarului. • Nu sunt permise mesajele text, e-mail-urile, etc in timpul orelor de seminar.
--	---

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul chimiei matematice și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională • Utilizarea cunoștințelor de bază din domeniul științelor fundamentale pentru explicarea și interpretarea relațiilor structura-proprietate • Analiza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă și calitativă a relațiilor structura-proprietate, structura-activitate biologică • Fundamentarea teoretică în rezolvarea problemelor specifice domeniului cu utilizarea unor principii și metode consacrate. • Aplicarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei și matematicii pentru elaborarea de proiecte profesionale • Identificarea și utilizarea adecvată a limbajului, conceptelor, abordărilor, teoriilor, modelelor și metodelor elementare pentru modelarea proprietăților fizico-chimice și biologice • Explicarea și interpretarea relațiilor QSAR și QSPR cu și fără sistem de calcul • Rezolvarea problemelor de precizie statistică a proprietăților fizico-chimice și biologice • Implementarea de soluții software pentru probleme tipice de statistică și calcul de descriptori moleculari • Utilizarea conceptelor de statistică și modelare moleculară aplicabile în chimie • Explicarea conținutului informatic al descriptorilor topologici și prin prelucrări statistice de date • Dezvoltarea de modele matematice pentru caracterizarea unor proprietăți chimice, fizice și biologice • Adaptarea și utilizarea modelelor matematice pentru proiectarea de structuri moleculare biologice active
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit • Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru • Informarea și documentarea permanentă în domeniul sau de activitate în limba română • Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Cunoașterea noțiunilor de chimie-matematică, teoria grafurilor, codificarea structurilor, construcția descriptorilor moleculari • Însușirea și aplicarea noțiunilor de prelucrare statistică • Crearea de modele teoretice utilizabile în modelarea moleculară
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază pentru realizarea de relații QSPR și QSAR • Dobândirea cunoștințelor referitoare statistică aplicabilă în chimie și inginerie chimică • Dobândirea cunoștințelor referitoare la modelarea proprietăților fizice, chimice și biologice

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
1. Noțiuni de chimie matematică. Teoria grafurilor Noțiuni de baza.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Matrici topologice. Indici topologice Matrici de baza utilizati (adiacenta, distanta, conectivitate). Matrici strat. Indici bazati pe matricea de adiacenta, distanta, conectivitate, strat. Constructia indicilor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Matrici topologice. Indici topologice Matrici complecsi. Matrici 3D. Indici de centricitate si centrocomplexitate. Indici 3D		
3. Simetrie si similaritate. Structuri inalt simetrice Similaritatea structurilor moleculare 2D și 3D. Similaritatea structurilor moleculare descrise prin câmpuri de forțe si cuanto-chimic. Indici de similaritate	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Modele avansate QSPR/QSAR Modelul Hansch. Modelul Fischer. Modelul TI-MTD.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Aplicatii ale teoriei grafurilor in chimie Metode de clusterare. Prelucrarea datelor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Elemente de statistica Noțiuni de baza (media aritmetica, dispersia, abaterea, eroarea standard). Regresii liniare. Cautarea regresiei optime.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
9. Analiza de date Analiza clusterilor. Analiza componentelor principale. Analiza factoriala.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Constructia grafurilor moleculare. Optimizarea structurilor. Optimizarea structurilor la energie minima. Utilizarea software-ului pentru constructia structurilor.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Calcul de indici topologici Utilizarea software-ului pentru calcule de matrici si indici topologici.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Utilizarea bazelor de date chimice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Utilizarea software-ului pentru analiza de regresie. Calcul de regresie mono- si multivariabila. Reprezentari grafice. Ecuatii de regresie	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Predictia de structuri biologic-active Metode de calcul pentru obtinerea proprietati fizico-chimice si biologice pentru structuri noi	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	

Bibliografie

1. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, *Topologie Moleculară*, **COMPREX**, Cluj, 1995.
2. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, *Molecular Topology and Its Applications*, **EFICON**, București, 2006.
3. M. V. Diudea, I. Gutman, L. Jantschi, *Molecular Topology*, Nova Science Publishers, Inc. Huntington, New York, 2002.
4. M. V. Diudea, Cs. L. Nagy, *Periodic Nanostructures*, Springer, 2007.

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
1. Constructia de structuri chimice. Utilizarea programelor de constructie a structurilor chimice.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Constructia de structuri chimice. Optimizarea structurilor chimice.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Calculul matricilor topologici Utilizarea programelor de calcul al matricilor topologici	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Calculul indicilor topologici Utilizarea programelor de calcul al indicilor topologici	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Realizarea bazelor de date Operatii cu baze de date. Realizarea bazelor de date structura-indici topologici	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
6. Utilizarea programelor de statistica. Realizarea regresiiilor. Interpretarea datelor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
7. Simetrie. Structuri inalt simetrice Cautarea structurilor simetrice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Similaritate moleculara Utilizarea programelor de calcul pentru simetrie moleculara		
9. Realizarea modelelor QSPR Cautarea regresiiilor optime in vederea realizarii modelelor QSPR	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Realizarea modelelor QSAR Cautarea regresiiilor optime in vederea realizarii modelelor QSAR	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Aplicatii ale teoriei grafurilor in chimie Metode de clusterare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Aplicatii ale teoriei grafurilor in chimie Prelucrarea datelor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	

13. Predictia proprietatilor fizico-chimice Predictia proprietatilor fizico-chimice pentru structuri noi	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Predictia proprietatilor biologice Predictia proprietatilor biologice pentru structuri noi. Construcia de structuri biologic-active.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
Bibliografie 1. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, <i>Topologie Moleculară</i> , COMPRES , Cluj, 1995. 2. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, <i>Molecular Topology and Its Applications</i> , EFICON , București, 2006. 3. M. V. Diudea, I. Gutman, L. Jantschi, <i>Molecular Topology</i> , Nova Science Publishers, Inc. Huntington, New York, 2002. 4. M. V. Diudea, Cs. L. Nagy, <i>Periodic Nanostructures</i> , Springer, 2007.		

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

<ul style="list-style-type: none"> Cursul invata utilizatorii de software specific cum să transmită informații matematice care sa continainformatii asupra proprietatilor fizico-chimice si biologice Scopul cursului este de a realiza o conexiune intre chimie si matematica, in vederea proiectarii de noi structuri organice, cat si de a codifica si cuantifica informatia chimica in vederea utilizarii in prelucrarea informatica
--

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 problematicei tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	80%
	Rezolvarea corectă a problemelor		

10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator	Referatele de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice – se predau în ultima săptămână de activitate didactică Colocviu laborator – test – se susține în ultima săptămână de activitate didactică	20%
	Calitatea referatelor pregătite		
	Activitatea desfășurată în laborator		
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; realizarea de relații QSPR/QSAR; construcție de indici topologici; predicția proprietăților fizico-chimice și biologice; construcția de structuri simetrice și similare 			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

30 martie 2017

Conf.Dr. Katona Gabriel

Conf.Dr. Katona Gabriel

Data avizării în departament
30 martie 2017

Semnătura directorului de departament
Lect.Dr. Szabó Gabriella Stefánia

q 