

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Univeristatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie si Inginerie Chimică
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Master/TMSC

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Relatii structura-activitate biologica– CMM6644</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf.Dr. Gabriel Katona						
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf.Dr. Gabriel Katona						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Op

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					40
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					40
Tutoriat					4
Examinări					4
Alte activități: .....					-
3.7 Total ore studiu individual	108				
3.8 Total ore pe semestru	150				
3.9 Numărul de credite	6				

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

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

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise</li> <li>Studentii se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator.</li> <li>Studentii nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune</li> <li>Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării</li> <li>Pentru predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi</li> <li>Este interzis accesul cu mâncare în laborator</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Operarea cu noțiuni de teoria grafurilor și chimie matematica avansata</li> <li>• Abilitatea de a utiliza diferitele tehnici de modelare a proprietatilor fizico-chimice si biologice ale compusilor organici, precum si prelucrarea statistica a datelor</li> <li>• Capacitatea de a utiliza noțiuni in vederea proiectarii de noi structuri biologice active</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată.</li> <li>• Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse.</li> <li>• Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională.</li> </ul>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>• dobândirea cunoștințelor teoretice privind modelarea moleculara, dezvoltarea capacității de rezolvare de probleme.</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Acumularea de cunoștințe teoretice de specialitate prin învățarea, înțelegerea și aplicarea conceptelor legate de chimia matematica reactie</li> <li>• Dezvoltarea capacitatii de analiza si sinteza a problemelor legate de relatii structura chimica-proprietati fizico-chimice si biologice</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Noțiuni introductive. Variabile.	Prelegerea. Explicația Conversația	
8.1.2. Regresii mono, bi- si multivariabile utilizate prelucrarea statistica a datelor	Prelegerea. Explicația Conversația	
8.1.3. Clasificarea si utilizarea modelelor QSPR	Prelegerea; Explicația Conversația	
8.1.4. Clasificarea si utilizarea modelelor QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.5. Indici complecsi	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.6. Descriptori fragmentali	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.7. Instrumente in proiectarea indicilor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.1.8. Modele avansate QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.9. Modele QSAR 3D	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	

8.1.10. Evaluarea calitativa a modelelor QSPR si QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.11. Programe utilizate in modelare	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12. Analiza de componente principale, PCA	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Proiectarea structurilor biologice active	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Aplicatii QSPR, QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	

#### Bibliografie

1. M.V. Diudea, Topologie moleculară, Ed. Compres, 1995.
2. M. V. Diudea, (Ed.), *QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors*, NOVA SCIENCE, New York, 2001., 438p.
3. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, *Molecular Topology*, NOVA SCIENCE, New York, 2002. , 329p.
4. O. M. Minailiuc and M. V. Diudea, TI-MTD Model. Applications in Molecular Design. In : M. V. Diudea, Ed., *QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors*. NOVA SCIENCE, New York, 2001, pp. 363-388.
5. M. Dehmer (Ed.), K. Varmuza (Ed.), D. Bonchev (Ed.), F. Emmert-Streib (Series Ed.), *Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR*, Wiley-Blackwell 2012
6. M. Karelson, *Molecular Descriptors in QSAR/QSPR*, 2000
7. I. Gutman (Ed.), B. Furtula (Ed.), *Novel Molecular Structure Descriptors - Theory and Applications, I and II*, University of Kragujevac, Kragujevac, Serbia, 2010

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
Utilizarea programelor de calcul	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția indicilor complecși	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția matricilor strat	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Analiza statistică	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția de modele QSPR	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția de modele QSAR	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Proiectare de structuri noi	Explicația; Problematizarea; Conversația;	

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

- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplină, 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	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	Referat	20%
	Calitatea referatelor pregătite		
	Activitatea desfășurată la seminar		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului.</li><li>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 cascade pentru sinteza unui subsistem de schimbătoare de căldură.</li></ul>			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

04 aprilie 2020

Conf.Dr. Katona Gabriel

Conf.Dr. Katona Gabriel

Data avizării în departament  
27.04.2020

Semnătura directorului de departament  
Prof.Dr.Ing. Paizs Csaba