

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Tehnică din Cluj-Napoca, Centrul Universitar Nord Baia Mare
1.2 Facultatea	Științe
1.3 Departamentul	Chimie și Biologie
1.4 Domeniul de studii	Biologie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Specializarea / Programul de studii	Biochimie aplicata

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	RELAȚII STRUCTURĂ- PROPRIETĂȚI ÎN COMPUȘI BIOLOGIC ACTIVI						
2.1 Codul disciplinei	SBIOM 101						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. dr. Berinde Mărioara Zoïța						
2.3 Titularul activităților de aplicații	Conf. dr. Berinde Mărioara Zoïța						
2.4 Anul de studii	I	2.5 Semestrul	2	2.6 Tipul de evaluare	Ex	2.7 Regimul disciplinei	Ob

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	din care: 3.1.1 curs	2	3.1.2 seminar	2
		din care: 3.1.3 laborator		3.1.4 proiect	
3.2 Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.2.1 curs	28	3.2.2 seminar	28
		din care: 3.2.3 laborator		3.2.3 proiect	
Distribuția fondului de timp					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					42
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					48
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					44
Tutoriat					14
Examinări					4
Alte activități: traducere articole					14
3.3 Total ore studiu individual	152				
3.4 Total ore pe semestru	208				
3.5 Numărul de credite	8				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	Parcurgera cursului: Chimie organica
4.2 de competențe	

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	Sala de curs dotata cu tabla, creta colorata, calculator, videoproiector
5.2. de desfășurare a seminarului/laboratorului	Sala de seminar dotata cu tabla, creta colorata, calculator, videoproiector

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	C.1 Operarea cu noțiuni specifice topologiei moleculare și studiilor QSAR; C.2 Identificarea și caracterizarea compușilor biologic activi; C.3 Codificarea numerică a structurii chimice a compușilor biologic activi; C.4 Modelarea matematică a proprietăților fizico-chimice și biologice a compușilor biologic activi;
	ABILITĂȚI: A.1 Utilizarea corectă a metodelor QSAR A.2 Aplicarea cunoștințelor de topologie moleculară și regresie liniară pentru modelarea activității biologice a compușilor biologic activi.
Competențe transversale	T.1 Manifestarea unei atitudini responsabile față de domeniul științific și didactic, valorificarea potențialului propriu pe plan profesional, respectarea regulilor de muncă riguroasă și eficientă pentru executarea unor sarcini profesionale complexe. T.2 Conștientizarea nevoii de formare continuă; utilizarea eficientă a resurselor și tehnicilor de învățare, pentru dezvoltarea personală și profesională

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	O.1 Cunoașterea conceptelor și a metodelor utilizate în studii QSAR O.2 Dezvoltarea capacității de explorare/investigare a relației structură-proprietăți, în scopul “proiectării” unor structuri moleculare cu activitate biochimică specificată.
7.2 Obiectivele specifice	O.1 Cunoașterea modului de reprezentare prin grafuri moleculare a compușilor cu activitate biochimică O.2 Cunoașterea modalităților de calculare a descriptorilor topologici și aplicarea acestora pe seturi de compuși biologic activi; O.3 Explicarea modelelor QSAR obținute la diferite clase de compuși biologic activi și de asemenea interpretarea parametrilor statistici obținuți; O.3 Însușirea metodologiei de validare a modelelor QSAR O.4 Identificarea aspectelor interdisciplinare cu domenii conexe biologiei (chimie, statistică, topologie moleculară, informatică);

8 Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1 Introducere. Aspecte istorice privind metodele utilizate în analiza compușilor biologic activi. Metode moderne utilizate în scopul “proiectării” unor structuri moleculare cu activitate biochimică specificată. Semnificatia notiunii de structura chimica. Scurt istoric al evolutiei conceptului de structura chimica.	Expunerea, Explicația, Exemplificarea, Studiu de caz	2 ore
8.1.2 Principii generale de stabilire a structurii unui compus chimic. Legături chimice. Interacțiuni intermoleculare. Grupe functionale. Identificarea motivelor fundamentale pentru care o anumită moleculă este activă biochimic.	Expunerea, Explicația, Exemplificarea, Studiu de caz	2 ore
8.1.3 Elemente de topologie moleculară. Grafuri moleculare. Matrici topologice: definiție, clasificare, construcție. Determinarea prin calcul a structurilor moleculare. Descriptori topologici utilizați în relația cantitativă dintre structura și activitatea biologică: definiție, clasificare, construcție.	Expunerea, Explicația, Exemplificarea, Studiu de caz	6 ore
8.1.4 Relații cantitative structură-activitate biologică, QSAR. Metodologia cercetării QSAR. Regresia liniară. Parametri statistici. Set de calibrare. Set de predicție. Validarea unui model. Estimare.	Expunerea, Explicația, Exemplificarea, Studiu de caz	4 ore

8.1.5 Prezentarea proprietatilor compusilor biologic activi, existente in literatura in studii QSAR pentru diferite clase de compusi. Aplicatii: prezentarea rezultatelor modelarii matematice a unor activitati biochimice: activitate toxica, activitate insecticida, activitate antiinflamatorie, activitate anticancerigena, activitate anticonvulsiva, activitate edulcoranta, activitate ierbicida, activitate bactericida, activitate fungicida, activitate antimicotică, etc., exemplificate in literatura.	Studiu de caz Expunerea Prezentare ppt	14 ore
Bibliografie (selectivă): 1. Berinde Z., Aplicații ale topologiei moleculare în studiul proprietăților fizico chimice ale compușilor organici, Ed. Cub Press, Baia Mare, 2001; 208 pag., ISBN 973-9451-03-9 2. Cercasov C., Dumitrascu F., Popa C. V., Draghici C., Compuși cu acțiune terapeutică naturală și de sinteză, Lucrări practice, Editura Universității din București, 2004 3. Moțoc I., Structura moleculelor și activitatea biologică, Editura Facla, Timișoara, 1980 4. Tarko L., Abordarea QSPR/QSAR în proiectarea moleculară. Teorie și practică, Editura Universitară, București, 2008 5. Savel I., Substanțe biologic-actives, Editura Tehnică, București, 1997 6. Berinde, Z., QSTR mathematical models for the toxicity of aliphatic carboxylic acids on tetrahymena pyriformis, Creat. Math. Inform., 22 (2013), No. 2, 151–160 7. 6. Articole științifice selectate – studii QSAR		
8. 2 Seminar	Metode de predare	Observații
8.2.1 Compuși biologic activi - analiza structurilor chimice	Modelarea grafică	2 ore
8.2.2 Elaborarea grafurilor moleculare pentru compuși biologic activi	Modelarea grafică	2 ore
8.2.3 Calcularea unor descriptorilor topologici pentru diferiți compuși biologic activi	Problematizarea Exercițiul	4 ore
8.2.4 Calcularea dreptei de regresie pentru un set de date, interpretarea coeficienților statistici, interpretarea corelației	Problematizarea Exercițiul Studiu de caz	6 ore
8.2.5 Utilizarea metodelor de validare a unui model pe cazuri concrete	Problematizarea Exercițiul Studiu de caz	4 ore
8.2.6 Prezentarea rezultatelor și comentarea unor studii QSAR din literatura.	Expunerea Studiu de caz Prezentarea ppt	8 ore
8.2.5 Direcții de dezvoltare în viitor în domeniul QSAR	Dialogul Expunerea	2 ore
Bibliografie (selectivă): 1. Berinde Z., Aplicații ale topologiei moleculare în studiul proprietăților fizico chimice ale compușilor organici, Ed. Cub Press, Baia Mare, 2001; 208 pag., ISBN 973-9451-03-9 2. Moțoc I., Structura moleculelor și activitatea biologică, Editura Facla, Timișoara, 1980 3. Tarko L., Abordarea QSPR/QSAR în proiectarea moleculară. Teorie și practică, Editura Universitară, București, 2008 4. Berinde, Z., QSTR mathematical models for the toxicity of aliphatic carboxylic acids on tetrahymena pyriformis, Creat. Math. Inform., 22 (2013), No. 2, 151–160 5. Articole științifice – studii QSPR		

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

Această materie de studiu cu un pronunțat caracter interdisciplinar, chimie-biologie-inginerie-informatica, este esențială în pregătirea viitorilor cercetători în biologia aplicată/ chimia aplicată / chimia combinatorială/ biologie moleculară / biochimie/ biochimia medicamentului. Relațiile cantitative structura-activitate referă în general o activitate biologică măsurabilă iar tehnica de investigare ce folosește QSAR este o tehnică modernă folosită în multe domenii prioritare, incluzând farmaceutica, mediul, biotehnologia și microbiologia. Literatura de specialitate conține astăzi un număr mare de relații structura-activitate care evaluează impactul produselor chimice asupra mediului. Modelarea, testarea și identificarea de noi compuși biologic activi, prin impactul său în agricultură, sănătate și industrie, este instrumentul principal al dezvoltării economice și calității vieții.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Cunoașterea principalelor aspecte teoretice prezentate la curs. Calcularea descriptorilor topologici și aplicarea etapelor de determinare a unui model QSAR;	Examen scris/ Prezentarea unor studii QSAR pentru diferite clase de compuși organici.	60%
10.5 Seminar	Capacitatea de a explica și opera cu noțiunile prezentate la curs; Capacitatea de a folosi, în context nou, conceptele de la curs;	Verificarea continuă a activității din timpul orelor de seminar/Verificarea materialelor aplicative elaborate individual	30%
10.6	Criterii ce vizează aspectele atitudinale: seriozitatea, interesul pentru însușirea tehnicilor QSAR; Participarea activă la curs; Participarea activă la seminar;		10%
10.7 Standard minim de performanță: Cel puțin nota 5 la examenul scris, și cel puțin nota 5 pentru media calculată. Presupunere: însușirea și aplicarea corectă a metodelor și tehnicilor specifice studiilor QSAR.			

Titularul cursului
conf. univ. dr. Berinde Marioara Zoita