

## FIȘA DISCIPLINEI

<b>Universitatea</b>	Babeș-Bolyai			
<b>Facultatea</b>	Chimie și Inginerie Chimică			
<b>Specializarea</b>	Doctorat în Chimie			
<b>I.</b>				
<b>Denumire disciplină</b>	Modelare moleculară		<b>Categoria</b> (DF/DD/DS/DC): DS	
<b>Structură disciplină</b> (Nr. ore săptămânal)				
<b>II.</b>				
Semestrul	Curs	Seminar	Laborator	Proiect
2	1	-	1	1
<b>III.</b>				
<b>Statut disciplină</b>	Obligatorie	Opțională	Facultativă	
(marchează cu X)		x		
<b>IV.</b>				
<b>Titular disciplină</b>				
	Curs	Seminar	Laborator	Proiect
Numele și prenumele	JÄNTSCHI Lorentz	-	JÄNTSCHI Lorentz	JÄNTSCHI Lorentz
Instituția	UBB Cluj	-	UBB Cluj	UBB Cluj
Departament	SDC	-	SDC	SDC
Titlul științific	doctor	-	doctor	doctor
Gradul didactic	profesor	-	profesor	profesor
Încadrarea	Asociat	-	Asociat	Asociat
Vârsta	46	-	46	46
<b>V.</b>				
<b>Obiectivele disciplinei</b> (curs și aplicații) (maxim 5 rânduri, în corelare cu obiectivele și misiunea specializării)				
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ Formarea priceperilor și deprinderilor de utilizare a principiului parsimoniei în elaborarea și utilizarea modelelor de structură moleculară și proces biochimic;</li> <li>○ Formarea priceperilor și deprinderilor de realizare a unei analize de corelație și de regresie structură-activitate pentru o clasă de compuși;</li> <li>○ Dezvoltarea abilităților de manipulare a bazelor de date de modelare moleculară;</li> <li>○ Dezvoltarea abilităților de utilizare a programelor de modelare moleculară.</li> </ul>				
<b>VI.</b>				
<b>Conținutul disciplinei</b>				<b>Ore/săpt.</b>
<b>VI.1. Curs (capitole/subcapitole)</b>				<b>14(14×1)</b>
<b>Curs 1. Cap 1. Structura moleculară. §1.1.</b> Formule chimice: formula brută, formula moleculară, formula structurală;				1
<b>Curs 2. Cap 1. Structura moleculară. §1.2.</b> Structura moleculară: primară, secundară, terțiară, cuaternară;				1
<b>Curs 3. Cap 2. Modele moleculare. §2.1.</b> Topologie moleculară, geometrie moleculară;				1
<b>Curs 4. Cap 2. Modele moleculare. §2.2.</b> Teoria grafurilor chimice: grafuri, matrici, invarianti, polinoame;				1
<b>Curs 5. Cap 3. Modele de proces. §3.1.</b> Teoria seturilor moleculare: mulțimi, grafuri de reacție;				1
<b>Curs 6. Cap 3. Modele de proces. §3.2.</b> Modele fizice de interacțiune: Schrödinger, Coulomb, Newton, forțe nucleare, câmp, potențial, energie;				1
<b>Curs 7. Cap 4. Proprietăți moleculare. §4.1.</b> Proprietăți atomice: număr atomic, masă atomică, electronegativitate, sarcină parțială, etc.;				1

<b>Curs 8. Cap 4. Proprietăți moleculare. §4.2.</b> Proprietăți și activități moleculare: fizice (temperatură de topire și fierbere, constantă de ionizare, etc.), chimice (reactivitate, timp de retenție, etc.) și biologice (coeficient de partiție octanol/apă, activitate erbicidă, etc.);	1
<b>Curs 9. Cap 5. Energia și entropia moleculară. §5.1.</b> Entropia: Hartley, Shanon, Renyi;	1
<b>Curs 10. Cap 5. Energia și entropia moleculară. §5.2.</b> Potențialul Lennard-Jones, minimizarea energiei potențiale;	1
<b>Curs 11. Cap 6. Analiza de corelație și regresie. §6.1.</b> Analiza de corelație a mărimilor cantitative și calitative: Pearson, Spearman, Kendall, Goodman-Kruskal;	1
<b>Curs 12. Cap 6. Analiza de corelație și regresie. §6.2.</b> Analiza de regresie: liniară simplă, multiplă, analiza de componente principale, analiza de componente dominante, analiza factorilor;	1
<b>Curs 13. Cap 7. Studii de caz. §7.1.</b> Modelarea moleculară a toxicității sedimentelor marine;	1
<b>Curs 14. Cap 7. Studii de caz. §7.2.</b> Modelarea moleculară a activității erbicide a triazinelor;	1
<b>VI.2. Seminar</b>	-
<b>VI.3. Lucrări de laborator</b>	<b>14(14×1)</b>
<b>L1.</b> ChemWindow - Program pentru reprezentarea structurii moleculare 2D - Utilizarea pentru reprezentarea acizilor organici;	1
<b>L2.</b> ChemOffice - Program pentru reprezentarea structurii moleculare 2D - Utilizarea pentru reprezentarea aminelor;	1
<b>L3.</b> HyperChem - Program pentru reprezentarea structurii moleculare 3D - Utilizare pentru reprezentarea aminoacizilor;	1
<b>L4.</b> Molecular Modeling Pro - Program pentru reprezentarea structurii moleculare 3D - Utilizare pentru reprezentarea zaharurilor;	1
<b>L5.</b> deMon2k, GAMESS, MOLDEN, MOPAC, MPQC, NWChem, Octopus - Programe pentru optimizarea geometriei moleculare - Utilizare pentru optimizarea geometriei diptidelor;	1
<b>L6.</b> deMon2k, GAMESS, MOLDEN, MOPAC, MPQC, NWChem, Octopus - Programe pentru optimizarea geometriei moleculare - Utilizare pentru optimizarea geometriei unei serii de esteri;	1
<b>L7.</b> ChemFinder, PubChem - Baze de date cu compuși chimici - Utilizarea pentru căutarea și caracterizarea erbicidelor organofosforice;	1
<b>L8.</b> Belstein, DrugBank, ChemSpider - Baze de date cu compuși chimici - Utilizarea pentru căutarea și caracterizarea eterilor volatili;	1
<b>L9.</b> Dragon - Program pentru topologie moleculară - Utilizarea pentru analiza alcanilor;	1
<b>L10.</b> Topocluj - Program pentru topologie moleculară - Utilizarea pentru analiza compușilor cu heterocicluri;	1
<b>L11.</b> FPIF și MDFV - Programe pentru geometrie moleculară - Utilizarea pentru analiza triptidelor;	1
<b>L12.</b> MDF - Programe pentru geometrie moleculară - Utilizarea pentru analiza compușilor aromatici policiclici;	1
<b>L13.</b> Statistica, SPSS, Excell, <a href="http://1.academicdirect.org/Statistics/">http://1.academicdirect.org/Statistics/</a> : Programe pentru analiza de corelație și regresie - Utilizarea pentru analiza bifenililor policlorurați;	1
<b>L14.</b> Slide - Program pentru reprezentarea datelor - Reprezentarea dependențelor în dendrimeri și pentru Regresii neliniare - Analiza de regresie a entropiei și energiei dendrimerilor;	1
<b>VI.4. Tematică proiect</b>	<b>14 (7×2)</b>
<b>P1.</b> Matricea de adiacență în grafuri și mărimile derivate ale acesteia (invarianți, polinoame) - Utilizarea acesteia în descrierea bioacumulării compușilor chimici în organismele marine;	2
<b>P2.</b> Matricea de incidență în grafuri și mărimile derivate ale acesteia (invarianți, polinoame)	2

- Utilizarea acesteia în descrierea bioacumulării compușilor chimici în plante alogame;	
<b>P3.</b> Matricea de distanță în grafuri și mărimile derivate ale acesteia (invarianti, polinoame) - Utilizarea acesteia în descrierea bioacumulării compușilor chimici în plante alogame;	2
<b>P4.</b> Matricea de detur în grafuri și mărimile derivate ale acesteia (invarianti, polinoame) - Utilizarea acesteia în descrierea bioacumulării compușilor chimici în plante alogame;	2
<b>P5.</b> Utilizarea coeficienților de corelație a rangurilor (Pearson, Spearman, Kendall, Goodman-Kruskal) în analiza gradului de dulce la zaharuri;	2
<b>P6.</b> Verificarea ipotezelor statistice de distribuție normală pentru familia de descriptori moleculari MDF ce caracterizează toxicitatea relativă a unei clase de para-fenoli;	2
<b>P7.</b> Selecția variabilelor în regresia structură-activitate folosind meta-euristici pentru caracterizarea toxicității derivaților benzenului;	2

## VII. Bibliografie

1. Diudea MV, Gutman I, Jäntschi L. Molecular Topology. Nova Science, Huntington, NY, USA, 2001 (Ed. I), 2002 (Ed. II), 332 p. online: [http://lori.academicdirect.org/books/work\\_list.php?user=lori&id=102](http://lori.academicdirect.org/books/work_list.php?user=lori&id=102)
2. Ungureșan ML, Jäntschi L, Gligor DM. Aplicații educaționale de chimie pe calculator. MediaMira, Cluj-Napoca, 2004, 250p. online: [http://lori.academicdirect.org/books/work\\_list.php?user=lori&id=115](http://lori.academicdirect.org/books/work_list.php?user=lori&id=115)
3. Jäntschi L. Microbiologie, toxicologie și studii fitosanitare, AcademicDirect, Cluj-Napoca, 2005, 75 p. online: [http://lori.academicdirect.org/books/work\\_list.php?user=lori&id=116](http://lori.academicdirect.org/books/work_list.php?user=lori&id=116)
4. Bolboacă SD, Jäntschi L. How Good the Characteristic Polynomial Can Be for Correlations?. Int J Mol Sci 2007;8:335-345, online: [http://lori.academicdirect.org/articles/work\\_list.php?user=lori&id=128](http://lori.academicdirect.org/articles/work_list.php?user=lori&id=128)
5. Bolboacă SD, Jäntschi L. Pearson Versus Spearman, Kendall's Tau Correlation Analysis on Structure-Activity Relationships of Biologic Active Compounds, Leonardo J Sci 2006;9:179-200, online: [http://lori.academicdirect.org/articles/work\\_list.php?user=lori&id=58](http://lori.academicdirect.org/articles/work_list.php?user=lori&id=58)
6. Jäntschi L, Bolboacă SD. The Jungle of Linear Regression Revisited. Leonardo El J Pract Technol 2007;10:169-187, online: [http://lori.academicdirect.org/articles/work\\_list.php?user=lori&id=130](http://lori.academicdirect.org/articles/work_list.php?user=lori&id=130)
7. Jäntschi L, Bolboacă SD. Results from the Use of Molecular Descriptors Family on Structure Property/Activity Relationships. Int J Mol Sci 2007;8:189-203, online: [http://lori.academicdirect.org/articles/work\\_list.php?user=lori&id=121](http://lori.academicdirect.org/articles/work_list.php?user=lori&id=121)
8. Librăria de soft <http://l.academicdirect.org>  
Cursurile și materialele afișate pe Website-ul disciplinei  
Orice sursa de specialitate, avizată științific

## VIII. Metode didactice folosite

Prezentare interactivă folosind video-proiectorul	Curs
-	Seminar
Experimente individuale sau în grupuri mici de studenți (maxim 3) de modelare moleculară folosind protocol de lucru	Laborator
Activitate individuală de cercetare pe teme prestabilite finalizată cu susținere de proiect de disciplină pe bază de protocol de cercetare	Proiect

## IX. Forme de evaluare

Activitate	Tip evaluare	Pondere
Curs	Examen tip test grilă	30%
Laborator	Colocviu	35%
Proiect	Referat	35%

Data: 1.1.2019

Titular curs,  
Prof. Lorentz JÄNTSCHI



## FIȘĂ LABORATOR DIDACTIC

1. Denumire laborator: Modelare matematică și computațională în biologie și chimie
2. Disciplină deservită: Modelare moleculară
3. Locație (corp clădire, sala): B.-dul Muncii 1034-105, Sala C500, C501 & C502
4. Număr de locuri (studenți): 20
5. Suprafața: 65 m<sup>2</sup>
6. Dotare

Tehnică de calcul:

Server baze de date	<ul style="list-style-type: none"> <li>• IP: 193.226.7.200;</li> <li>• Suport: MySQL;</li> <li>• Conectivitate: <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Internet;</li> <li>○ IP intranet 172.27.211.4 (mdfv) - cca. 900Gb;</li> <li>○ IP intranet 172.27.211.5 (sensors) - cca. 500Gb;</li> </ul> </li> <li>• Achiziție: 2006;</li> </ul>
Server modelare moleculară	<ul style="list-style-type: none"> <li>• IP: 193.226.7.203;</li> <li>• Suport: PHP;</li> <li>• Conectivitate: <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Internet;</li> <li>○ IP intranet 172.27.211.3 (comput) - 8xCPU P4, 32Gb RAM;</li> <li>○ IP intranet 172.27.211.4 (mdvf) - 8xCPU P4, 32Gb RAM;</li> </ul> </li> <li>• Achiziție: 2006;</li> </ul>
Server web	<ul style="list-style-type: none"> <li>• IP: 193.226.7.211;</li> <li>• Suport: Apache;</li> <li>• Conectivitate: <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Internet;</li> <li>○ Bandă intranet 172.27.211.2-20;</li> </ul> </li> <li>• Achiziție: 2008;</li> </ul>
Sisteme de deservire	<ul style="list-style-type: none"> <li>• IP intranet 172.27.211.3 (comput); <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Suport: FreeBSD (Unix);</li> <li>○ Achiziție: 2008;</li> </ul> </li> <li>• IP intranet 172.27.211.4 (mdfv); <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Suport: FreeBSD (Unix);</li> <li>○ Achiziție: 2008;</li> </ul> </li> <li>• IP intranet 172.27.211.5 (sensors); <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Suport: FreeBSD (Unix);</li> <li>○ Achiziție: 2008;</li> </ul> </li> </ul>
Rețea de calculatoare de birou	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Suport Hard: 10 calculatoare model P4</li> <li>• Achiziție: 2005;</li> <li>• Suport Soft: <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Software de operare Windows;</li> <li>○ Software de birotică Office;</li> <li>○ Software dedicat (vezi mai jos);</li> </ul> </li> <li>• Conectivitate: Internet;</li> </ul>
Software dedicat	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Statistica (achiziție 2008);</li> <li>• SPSS (achiziție 2008);</li> <li>• Molecular Modeling Pro (achiziție 2008);</li> <li>• ChemOffice (achiziție 2008);</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• HyperChem (achiziție 2008);</li> <li>• Dragon (achiziție 2008);</li> <li>• RasMol (freeware);</li> <li>• deMon2k (freeware);</li> <li>• GAMESS (freeware);</li> <li>• MOLDEN (freeware);</li> <li>• MOPAC (freeware);</li> <li>• MPQC (freeware);</li> <li>• NWChem (freeware);</li> <li>• Octopus (freeware);</li> <li>• Clustal X (freeware);</li> <li>• GABRIEL (freeware);</li> <li>• GAL (freeware);</li> <li>• GAML (freeware);</li> <li>• GARLI (freeware);</li> <li>• GDE (freeware);</li> <li>• GOAL (freeware);</li> <li>• LamarckianGA (freeware);</li> <li>• MacClade (freeware);</li> <li>• MEGA (freeware);</li> <li>• Mesquite (freeware);</li> <li>• metaGA (freeware);</li> <li>• ModelTest (freeware);</li> <li>• MrBayes (freeware);</li> <li>• MS BLAST (freeware);</li> <li>• NCBI BLAST (freeware);</li> <li>• PAUP* (freeware);</li> <li>• r8s (freeware);</li> <li>• RAGA (freeware);</li> <li>• SAGA (freeware);</li> <li>• S-System (freeware);</li> </ul>
--	---

Data: 1.1.2019

Nume titular disciplină,  
Prof. Lorentz JÄNTSCHI  
Semnătura

