

## FIȘA DISCIPLINEI (2014)

### 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
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie Avansată/ Master in Stiinte

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Relatia structura activitate biologica: CMR7222</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. dr. Mircea Diudea						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. dr. Mircea Diudea						
2.4 Anul de studiu	IV	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Opt

### 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:					108 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					38
Tutoriat					-
Examinări					10
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	• Nu este cazul
4.2 de competențe	• Nu este cazul

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

5.1 De desfășurare a cursului	• Studenții se vor prezenta la curs
5.2 De desfășurare a seminarului	• Prezenta la seminar este obligatorie

## 6. Competențe specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Descrierea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor și modelelor elementare privitoare la topologia compușilor chimici</li> <li>• Aplicarea notiunilor fundamentale în calculul matricilor de baza: adiacenta, distanta, detour, Wiener, Szeged, Cluj, shell.</li> <li>• Definirea și calculul indicilor topologici.</li> <li>• Descrierea polinomială a grafurilor moleculare.</li> <li>• Elemente de statistica.</li> <li>• Regresii liniare.</li> </ul> <p>C5.1. Descrierea și utilizarea de concepte, teorii și metode avansate în identificarea particularităților structurale care conferă unor compuși potențial aplicativ</p> <p>C5.2. Stabilirea modalităților teoretice și experimentale de corelare structură-proprietăți</p> <p>C5.3. Utilizarea relației structură-proprietăți în determinarea potențialului aplicativ a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</p> <p>C5.4. Analiza critică a diverselor abordări teoretice și experimentale în determinarea proprietăților care recomandă un compus/o clasă de compuși pentru utilizarea ca material</p> <p>C5.5. Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatură pentru identificarea relației dintre structură și proprietăți și caracterizarea unui reprezentant cu potențial aplicativ din clasele de compuși studiate</p>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Utilizarea calculatorului: Office; xls</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 topologia grafurilor chimice</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază pentru calculul matricilor, polinoamelor și indicilor topologici</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor necesare pentru aplicarea notiunilor fundamentale în scopul calculării relației structură-activitate biologică a compușilor organici.</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor referitoare la accesarea și utilizarea datelor cuprinse într-o bază de date pentru calculul QSAR/QSPR.</li> </ul>

## 8. Conținut

8.1 Curs (2 ore)	Metode de predare	Observații
8.1.1. <b>Relația structură-activitate biologică.</b> Activitate biologică, definiții, abordări calitative, relații cantitative, istoric.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.2. <b>Grafuri moleculare</b> Definiții, Matrici topologice, Matrici de Cluj, Matrici strat/shell	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.3. <b>Indici topologici</b> Indici de conectivitate, Indici de distanță, Indici de	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea,	

Cluj, Indici ponderati cu proprietati atomice	Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.4. Elemente de statistica</b>  Medii, dispersii, ecuatii de regresie, caracterizarea calitatii regresiilor	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.5. Similaritate moleculara</b>  Similaritate 2D, 3D, fingerprints, scoruri	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.6. Modele QSAR</b>  Regresii multiliniare, data-reduction	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.7. Anti-inflamatori non-steroidici AINS</b>  Clasificare, proprietati fizico-chimice, activitate biologica	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.8. Poluanți</b>  Dioxine, bifenili policlorurati, toxicitate, bioacumulare in lantul trofic	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.9. Pirimidine-Purine</b>  Clasificare, proprietati fizico-chimice, activitate biologica, functionalizare cu fullerene, nanostructuri	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.10. Fullerene, nanotuburi, grafene.</b>  Relatii graf-teoretice in poliedre, stabilitate, reactivitate, proprietati, utilizari ca vectori de medicamente	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.11. Functionalizarea nanostructurilor</b>  Fullerene, nanotuburi, grafene, aromaticitate, structuri de valenta Kekule, functionalizare.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.12. Baze de date</b>  PubChem, accesare, criterii de cautare, constructia de baze personale	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.13. Elaborare Proiect QSAR</b>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
<b>8.1.14. Scrierea unui articol QSAR</b>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
Bibliografie  1. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, <i>Topologie Moleculară</i> , <b>COMPREX</b> , Cluj, 1995. 2. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, <i>Molecular Topology and Its Applications</i> , <b>EFICON</b> , 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, Periodic Nanostructures, Springer, 2007. 5. M. V. Diudea, NANO curs, format electronic.		
8.2 Seminar/laborator (1 ora – 4 grupe)	Metode de predare	Observații
8.2.1. <b>Relatia structura-activitate biologica</b> Definitii, istoric, exemple.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.2. <b>Grafuri moleculare</b> Definitii, constructie/modelare	Training software Hyper-Chem	
8.2.3. <b>Indici topologici</b> Constructia, capacitatea de discriminare si corelare	Training software TOPOCLUJ	
8.2.4. <b>Elemente de Statistica</b> Medii, dispersii, ecuatii de regresie	Training software Statistica	
8.2.5. <b>Similaritate Moleculara</b> Definitii, indici de similaritate 2D, 3D	Training software SIMIL; TOPOCLUJ	
8.2.6. <b>Modele QSAR</b> Caracteristici, Exemple.	Training software Statistica, SPSS	
8.2.7. <b>Antiinflamatori non-steroidici AINS</b> Definitii; clasificare, Exemple.	Explicația; Conversația; Input formule structurale	
8.2.8. <b>Poluanți</b> Definitii; clasificare, Exemple.	Explicația; Conversația; Input formule structurale	
8.2.9. <b>Flavonoide</b> Definitii; clasificare, Exemple.	Explicația; Conversația; Input formule structurale	
8.2.10. <b>Fullerene, nanotuburi, grafene</b> Definitii, constructie, modelare	Explicația; Conversația; Software: Hyper-Chem	
8.2.11. <b>Funcționalizare nanostructuri</b> Funcționalizare structurala	Explicația; Conversația; Software: CVNET; TORUS JSCHM	
8.2.12. <b>Baze de date</b> Acces, criterii de acces, PubChem, constructia setului personal de date	Explicația; Conversația; Software: Windows; Internet	
8.2.13. <b>Elaborare Proiect QSAR</b> Corelatia structura-proprietati fizice/biologice; Calcul descriptori topologici, modele QSPR	Explicația; Conversația; Software: Power-Point	
8.2.14. <b>Sciere articol QSAR</b> Prezentarea datelor	Explicația; Conversația; Software: MS Office	
Bibliografie  1. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, <i>Topologie Moleculară</i> , <b>COMPREX</b> , Cluj, 1995. 2. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, <i>Molecular Topology and Its Applications</i> , <b>EFICON</b> , 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, Periodic Nanostructures, Springer, 2007.
5. M. V. Diudea, NANO curs, format electronic.
6. Internet; Pub Chem

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

- Conținutul disciplinei este 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 Interpretarea rezultatelor	Examen oral+proiect accesul la examen este condiționat de prezența la seminarii/laborator.	80%
10.5 Seminar	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar Calitatea temelor de casa	Teste de verificare a cunostintelor dobândite la seminar/laborator	20%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>• Nota 5 (cinci) atât la testele de verificare a cunostintelor cât și la examen.</li><li>• Recunoașterea principalelor tipuri de matrici topologice; clase de nano-structuri.</li></ul>			

Data completării

15 mai 2014

Data avizării în departament

.....25 mai 2014.....

Semnătura titularului de curs



Semnătura titularului de seminar



Semnătura directorului de departament

