

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	IPOB / Master in Stiinte

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Relatia structura activitate biologica: CMR7222						
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	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Obl

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	<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"> Studentii se vor prezenta la curs
5.2 De desfășurare a seminarului	<ul style="list-style-type: none"> Prezenta la seminar este obligatorie

6. Competențe specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Descrierea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor și modelelor elementare privitoare la topologia compușilor chimici • Aplicarea notiunilor fundamentale în calculul matricilor de baza: adiacenta, distanta, detour, Wiener, Szeged, Cluj, shell. • Definirea și calculul indicilor topologici. • Descrierea polinomială a grafurilor moleculare. • Elemente de statistica. • Regresii liniare. <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"> • Utilizarea calculatorului: Office; xls

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea cunoștințelor teoretice privind topologia grafurilor chimice
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază pentru calculul matricilor, polinoamelor și indicilor topologici • Dobândirea cunoștințelor necesare pentru aplicarea notiunilor fundamentale în scopul calculării relației structură-activitate biologică a compușilor organici. • Dobândirea cunoștințelor referitoare la accesarea și utilizarea datelor cuprinse într-o bază de date pentru calculul QSAR/QSPR.

8. Conținut

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

Cluj, Indici ponderati cu proprietati atomice	Demonstratia, Modelarea	
8.1.4. Elemente de statistica Medii, dispersii, ecuatii de regresie, caracterizarea calitatii regresiilor	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.5. Similaritate moleculara Similaritate 2D, 3D, fingerprints, scoruri	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.6. Modele QSAR Regresii multiliniare, data-reduction	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.7. Anti-inflamatori non-steroidici AINS Clasificare, proprietati fizico-chimice, activitate biologica	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.8. Poluanți Dioxine, bifenili policlorurati, toxicitate, bioacumulare in lantul trofic	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.9. Pirimidine-Purine Clasificare, proprietati fizico-chimice, activitate biologica, functionalizare cu fullerene, nanostructuri	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.10. Fullerene, nanotuburi, grafene. Relatii graf-teoretice in poliedre, stabilitate, reactivitate, proprietati, utilizari ca vectori de medicamente	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.11. Functionalizarea nanostructurilor Fullerene, nanotuburi, grafene, aromaticitate, structuri de valenta Kekule, functionalizare.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.12. Baze de date PubChem, accesare, criterii de cautare, constructia de baze personale	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.13. Elaborare Proiect QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.1.14. Scrierea unui articol QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
Bibliografie 1. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, <i>Topologie Moleculară</i> , COMPREX , 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, 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. Relatia structura-activitate biologica Definitii, istoric, exemple.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.2. Grafuri moleculare Definitii, constructie/modelare	Training software Hyper-Chem	
8.2.3. Indici topologici Constructia, capacitatea de discriminare si corelare	Training software TOPOCLUJ	
8.2.4. Elemente de Statistica Medii, dispersii, ecuatii de regresie	Training software Statistica	
8.2.5. Similaritate Moleculara Definitii, indici de similaritate 2D, 3D	Training software SIMIL; TOPOCLUJ	
8.2.6. Modele QSAR Caracteristici, Exemple.	Training software Statistica, SPSS	
8.2.7. Antiinflamatori non-steroidici AINS Definitii; clasificare, Exemple.	Explicația; Conversația; Input formule structurale	
8.2.8. Poluanți Definitii; clasificare, Exemple.	Explicația; Conversația; Input formule structurale	
8.2.9. Flavonoide Definitii; clasificare, Exemple.	Explicația; Conversația; Input formule structurale	
8.2.10. Fullerene, nanotuburi, grafene Definitii, constructie, modelare	Explicația; Conversația; Software: Hyper-Chem	
8.2.11. Funcționalizare nanostructuri Funcționalizare structurala	Explicația; Conversația; Software: CVNET; TORUS JSCHM	
8.2.12. Baze de date Acces, criterii de acces, PubChem, constructia setului personal de date	Explicația; Conversația; Software: Windows; Internet	
8.2.13. Elaborare Proiect QSAR Corelatia structura-proprietati fizice/biologice; Calcul descriptori topologici, modele QSPR	Explicația; Conversația; Software: Power-Point	
8.2.14. Sciere articol QSAR Prezentarea datelor	Explicația; Conversația; Software: MS Office	
Bibliografie 1. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, <i>Topologie Moleculară</i> , COMPREX , 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, 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 problemicii 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 problemicii 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">• Nota 5 (cinci) atât la testele de verificare a cunostintelor cât și la examen.• Recunoașterea principalelor tipuri de matrici topologice; clase de nano-structuri.			

Data completării

05 mai 2015

Data avizării în departament

.....

.....11 mai 2015.....

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

Semnătura directorului de departament

Prof. Dr. Cristian Silvestru