

## 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
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Masterat
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie Criminalistica (CCr) / chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Relatia structura activitate biologica: CMR7222						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. Dr. Niculina Hădade						
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf. Dr. Niculina Hădade						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	1	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					56
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					15
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					28
Tutoriat					6
Examinări					3
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 vor consulta suportul de curs pus la dispoziția lor înaintea fiecărui curs</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Nu este cazul</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Definirea notiunilor, conceptelor și teoriilor avansate și utilizarea limbajului specific în dezvoltarea de noi medicamente prin design rațional</li> <li>Explicarea și interpretarea unor proprietăți, concepte și abordări ale compusilor biologic activi și relației structură-activitate biologică. Stabilirea modalităților teoretice și experimentale de corelare structură-activitate biologică</li> <li>Utilizarea integrată a conceptelor și teoriilor avansate pentru rezolvarea de probleme noi privind designul și sinteza de substanțe cu acțiune terapeutică</li> <li>Utilizarea relației structură – activitate în vederea evaluării potențialului aplicativ a unor compusi bioactivi.</li> <li>Analiza critică a diverselor abordări teoretice și experimentale în determinarea proprietăților care recomandă un compus/o clasă de compusi pentru utilizarea ca material</li> <li>Aplicarea teoriilor și conceptelor însușite pentru 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 compusi studiate</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Analiza, sinteza și comunicarea informațiilor cu caracter științific, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală.</li> <li>Utilizarea calculatorului: Office; xls</li> <li>Autoevaluarea și identificarea cunostințelor și abilităților necesare ocupării unor poziții profesionale, formării continue și dezvoltării profesionale în corelație cu piața muncii</li> </ul>

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>Familiarizarea studenților cu noțiunile de bază și conceptele legate de structură, activitatea și proprietățile compusilor biologic activi utilizați în terapeutică. Corelarea structurii cu activitatea biologică</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dezvoltarea capacității de analiză a structurii compusilor biologic activi înțelegerea interacțiunilor acestora cu țintele lor biologice .</li> <li>Corelarea și utilizarea de cunoștințe de chimie organică, analiză structurală, biochimie, biologie moleculară și chimie teoretică</li> <li>Cunoștințe de bază privind structura, proprietățile, activitatea și toxicitatea compusilor biologic activi studiați precum și a mecanismelor de interacțiune medicament - țintă biologică.</li> <li>Dobândirea cunoștințelor necesare pentru aplicarea notiunilor fundamentale în scopul determinării relației structură-activitate biologică a compusilor organici și în designul rațional al medicamentelor.</li> <li>Dobândirea cunoștințelor referitoare la accesarea și utilizarea datelor cuprinse într-o bază de date pentru calculul QSAR/QSPR.</li> <li>Cunoașterea și utilizarea adecvată a noțiunilor menționate mai sus; explicarea, rezolvarea de probleme prin capacitatea de analiză și sinteză a conceptelor teoretice.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1. Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Relația structură – activitate biologică: scop și definiții. Prezentare generală a metodelor de identificare de noi medicamente. Designul rațional al Medicamentelor.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.2. Identificarea compusului biologic activ de bază ( <i>lead compound</i> ). Surse de compuși biologic activi.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.3. Modificarea compusului biologic activ de bază în vederea îmbunătățirii proprietăților (activitate, toxicitate, absorbție, metabolizare, eliminare)	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.4. Interacțiunea medicament țintă biologică. Tipuri de interacțiuni implicate în compecșii medicament-țintă biologică	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.5. Interacțiunea medicament țintă biologică. Mecanisme. Considerații stereochemice	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.6. Inhibitori ireversibili ai enzimelor	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.7. Inhibitori reversibili ai enzimelor	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.8. Medicamente care interacționează cu acizii nucleici.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.9. Rezistența la medicamente. Sinergie medicamentoasă.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.10. Metode computaționale de determinare a relației structură – activitate. Generalități. Efect biologic, formulare cantitativă.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.11. Noțiuni de calcul matricial și indici topologici.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.12. Elemente de statistică. Analiza de regresie.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.13. Modele avansate în descrierea cantitativă a relației structură-activitate biologică QSAR.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.14. 14. Algoritmul Cluj-Simil. Construcția hipermoleculi și vectorilor ponderați.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	

### Bibliografie

1. Richard B. Silverman, Mark W. Holladay *The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action* Ediția a-3-a San Diego, CA: Academic Press, **2014**.
2. D Livingstone; Andrew M Davis *Drug design strategies: quantitative approaches*, Royal Society of Chemistry (Great Britain), Cambridge : RSC Pub., **2012**.
3. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, *Topologie Moleculară*, COMPREX, Cluj, **1995**.
4. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, *Molecular Topology and Its Applications*, EFICON,

București, 2006.		
5. M. V. Diudea, I. Gutman, L. Jantschi, <i>Molecular Topology</i> , Nova Science Publishers, Inc. Huntington, New, 2002.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Surse de compuși prototip. Metode și tehnici de screening. Aspirina, Peniciline	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme.	
8.2.2. Identificarea de compuși prototip pe bază de fragmente. Spectrometrie de masă	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.2.3. Identificarea farmacoforului și a grupărilor auxofore.	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.2.4. Efectul modificărilor structurale asupra eficienței și proprietăților farmacocinetice. Taxolul	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.2.5. Serii omologe, Grupări bioisosterice	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.2.6. Optimizarea eficienței, selectivității, lipofilicității, toxicității	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.2.7. Identificarea interacțiunilor medicament - țintă biologică.	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.2.8 Designul de inhibitori reversibili și ireversibili ai enzimelor	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.2.9. Designul de medicamente care vizează acizii nucleici	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.2.10. Introducere in HyperChem ;TopoCluj;	Prelegerea; Explicația, Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.2.11. Caclule de descriptorimoleculari/topologici	Prelegerea; Explicația, Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.2.12. XLS analiza de regresie	Prelegerea; Explicația, Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.2.13. Baze de date; PubChem. Constructia BD personale.	Prelegerea; Explicația, Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
8.2.14. Algoritmul Cluj-Simil. Proiect.	Prelegerea; Explicația, Conversația; Descrierea, Demonstratia, Modelarea	
1. Richard B. Silverman, Mark W. Holladay <i>The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action</i> Ediția a-3-a San Diego, CA: Academic Press, 2014. 2. K.C. Nicolaou and. T. Montagnon - <i>Molecules That Changed The World</i> , , Wiley-VCH, 2008. 3. M.V. Diudea; O. Ivanciuc, <i>Topologie Moleculară</i> , COMPREX, Cluj, 1995. 4. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, <i>Molecular Topology and Its Applications</i> , EFICON, București, 2006.		

5. M. V. Diudea, I. Gutman, L. Jantschi, *Molecular Topology*, Nova Science Publishers, Inc. Huntington, New, 2002.

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

- Prin însușirea conceptelor tematico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina relația structură activitate biologică, studenții primesc un bagaj de cunoștințe care e în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 2M - RNCIS

**10. Evaluare**

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Gradul de însușire a tematicii tratate la curs și înțelegerea noțiunilor ilustrate prin răspunsuri corecte	Examen oral Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECTS al UBB	60%
	Modul de gândire, corectitudinea și argumentarea soluțiilor problemelor și exercițiilor		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor la exerciții și probleme, dovedind înțelegerea și însușirea tematicii	Verificare pe parcurs	40%
	Prezentarea unui medicament comercial, identificare de prototip, modificari structurale, faze de testare.	Verificarea pe parcurs	
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>• Obținerea notei 5 (cinci) la examen conform baremului, condiționarea intrării în examen de susținerea verificării de la seminar (cu minim 5(cinci))</li><li>• Surse de compuși biologic activi, metode de screening, metode de validare a structurii, determinarea eficienței ligandului și a indicelui terapeutic</li><li>• Identificarea farmacoformului, grupărilor auxofore, a interacțiunilor medicament-tintă biologică.</li></ul>			

Data completării

27.03.2017

Data avizării în departament  
14 aprilie 2017

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

Semnătura directorului de departament  
Prof. Dr. Cristian Silvestru