

## FIȘA DISCIPLINEI

### 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 și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Design computațional al produselor farmaceutice – CMM6630</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. dr. NAGY Levente Csaba						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. dr. NAGY Levente Csaba						
2.4 Anul de studiu	<b>II</b>	2.5 Semestrul	<b>3</b>	2.6. Tipul de evaluare	<b>VP</b>	2.7 Regimul disciplinei	<b>Opt</b>

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	<b>3</b>	Din care: 3.2 curs	<b>2</b>	3.3 seminar/laborator	<b>1</b>
3.4 Total ore din planul de învățământ	<b>42</b>	Din care: 3.5 curs	<b>28</b>	3.6 seminar/laborator	<b>14</b>
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					40
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					30
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					21
Tutoriat					8
Examinări					4
Alte activități:					–
3.7 Total ore studiu individual	103				
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 se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>Studentii au acces la suportul de curs în formatul electronic pe pagina web a cursului</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii se vor prezenta la laborator cu telefoanele mobile închise</li> <li>Temele trebuie rezolvate în mod individual de către fiecare student și se vor preda în 2 săptămâni de la primire în format electronic</li> <li>Calculatoarele vor fi oprite de către studenți la terminarea laboratorului</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

<b>Competențe profesionale</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul drug design și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională.</li> <li>Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea și interpretarea interacțiunilor enzimă–ligand.</li> <li>Analiza datelor și interpretarea corectă a rezultatelor teoretice obținute prin modelare.</li> <li>Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor legate de designul produselor farmaceutice.</li> <li>Utilizarea instrumentelor specializate de calcul tehnico-științific în bioinformatica.</li> </ul>
<b>Competențe transversale</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit și cu îndrumare calificată.</li> <li>Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate.</li> <li>Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba maternă, limba română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare</li> </ul>

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>Să familiarizeze studenții cu noțiunile de bază, conceptele, teoriile și modelele de bază din domeniul drug design</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază din domeniul modelării moleculare cu privire la drug design.</li> <li>Dobândirea cunoștințelor referitoare la etapele ce trebuie parcurse în cazul unui studiu de andocare moleculară.</li> <li>Dobândirea cunoștințelor referitoare la metodele de screening virtual bazate pe structura liganzilor și structura proteinei.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1 Prezentarea disciplinei. Introducere în drug design.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.2 Proprietăți moleculare. Enzime. Receptori. Farmacocinetică.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.3 Sisteme de coordonate. Grafică moleculară. Programe pentru vizualizarea, editarea și analiza structurilor moleculelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.4 Câmp de forță. Tipuri de interacțiuni între atomi. Tipuri de forțe field.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.5 Minimizarea energiei. Metode și algoritmi de minimizare. Echilibrarea sistemului. Suprafața de potențial.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.6 Dinamica moleculară. Parametrii esențiali pentru dinamica moleculară. Dinamica la temperatură constantă și variabilă.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.7 Librării și baze de date moleculare și structurale.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore

8.1.8 Andocare moleculară I. Introducere. Funcții scor. Energia de legătură.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.9 Andocare moleculară II. Andocare flexibilă și rigidă. Interpretarea rezultatelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.10 Mecanica moleculară. Analiza conformațională.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.11 Modelarea structurii 3D pe baza de omologie.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.12 Modele de farmacofori. Screening virtual.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.13 Metode QSAR/QSPR. 3D-QSAR.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.14 Soft pentru andocare moleculară și modelarea structurii 3D a proteinelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore

#### **Bibliografie**

1. D.C. Young, Computational drug design: A guide for computational and medicinal chemists. Wiley, 2009.
2. G. Schneider, K.H. Baringhaus, H. Kubinyi, Molecular design: Concepts and applications, Wiley, 2008.
3. H.D. Holtje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, Molecular Modeling, 3rd Ed., Wiley, 2008.
4. A. Leach, Molecular modelling: Principles and applications, 2nd Ed., Pearson Prentice-Hall, 2001.
5. C.J. Cramer, Essentials of computational chemistry: Theories and models, 2nd, Ed., Wiley, 2004.

8.2 Seminar / laborator (7 ședințe a câte 2 ore la 2 săptămâni)	Metode de predare	Observații
8.2.1 Construirea diferitelor modele moleculare folosind programe de modelare moleculară.	Explicația, Algoritmizarea, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.2 Analiză conformațională. Studiu de caz.	Explicația, Algoritmizarea, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.3 Minimizarea energiei. Câmpuri de forță. Suprafața de potențial.	Explicația, Algoritmizarea, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.4 Studiu de dinamică moleculară.	Explicația, Algoritmizarea, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.5 Modelarea structurii proteinei pe baza de omologie.	Explicația, Algoritmizarea, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.6 Andocare moleculară I. Andocare rigidă.	Explicația, Algoritmizarea, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.7 Andocare moleculară II. Andocare flexibilă.	Explicația, Algoritmizarea, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore

#### **Bibliografie**

1. D.C. Young, Computational drug design: A guide for computational and medicinal chemists. Wiley, 2009.
2. G. Schneider, K.H. Baringhaus, H. Kubinyi, Molecular design: Concepts and applications, Wiley, 2008.
3. H.D. Holtje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, Molecular Modeling, 3rd Ed., Wiley, 2008.
4. A. Leach, Molecular modelling: Principles and applications, 2nd Ed., Pearson Prentice-Hall, 2001.
5. C.J. Cramer, Essentials of computational chemistry: Theories and models, 2nd, Ed., Wiley, 2004.

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

<ul style="list-style-type: none"> <li>• Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina <i>Design computațional al produselor farmaceutice</i>, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS</li> </ul>
--

## 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	Examen oral/practic – accesul la examen este condiționat de prezența la laborator/seminar. Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB.	50%
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Seminar/ laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator	Prezentarea problemelor date ca temă de casă Activitatea desfășurată la seminar	50%
	Calitatea referatelor pregătite. Activitatea desfășurată în laborator		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>• Nota 5 (cinci) la examen, conform baremului</li><li>• Cunoașterea noțiunilor introductive; prelucrarea datelor experimentale.</li></ul>			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

25 februarie 2018

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

26 februarie 2018

Lect. dr. SZABÓ Gabriella-Stefânia