

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	Inginerie Chimică
1.4 Domeniul de studii	CHIMIE
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	CHIMIE AVANSATĂ / Master

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Materiale cu proprietăți de recunoaștere ionică și moleculară - CMR6124						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. dr. Alexandru Lupan						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. dr. Alexandru Lupan						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	DS ^a

^a DS = disciplină de specialitate

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/proiect	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/ proiect	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					30
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					12
Tutoriat					4
Examinări					3
Alte activități:					-
3.7 Total ore studiu individual	69				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	5				

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	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții vor închide telefoanele mobile pe perioada audierii cursului. • Studentii vor fi punctuali la programul de curs, nu se acceptă întârzieri.
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții vor închide telefoanele mobile pe perioada de desfășurare a seminarului. • Studentii se prezintă la sedințele de seminar având asupra lor conspectul și bibliografia tematicii abordate.

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Studiul relației structură –proprietăți în design-ul, obținerea și caracterizarea unor materiale cu diverse aplicații. • Descrierea și utilizarea de concepte, teorii și metode avansate în identificarea particularităților structurale care conferă unor compusi potențial aplicativ. • Stabilirea modalităților teoretice și experimentale de corelare structură-proprietăți. • Utilizarea relației structură-proprietăți în determinarea potențialului aplicativ a compusilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari. • Analiza critică a diverselor abordări teoretice și experimentale în determinarea proprietăților care recomandă un compus/o clasă de compusi pentru utilizarea ca material. • 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.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Executarea cu independență a sarcinilor profesionale complexe, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru propriu și propunând soluții inovative problemelor specifice apărute. • Planificarea, monitorizarea și asumarea sarcinilor profesionale ale unui grup/grupuri profesional(e) subordonate. • Demonstrarea capacității de coordonare a activității, gândire analitică, adaptabilitate și flexibilitate, colaborare cu membrii echipei.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea de noțiuni avansate din domeniul obținerii, caracterizării și utilizării materialelor cu proprietăți de recunoaștere ionică și moleculară.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Formarea de deprinderi pentru selectarea și utilizarea metodelor adecvate pentru investigarea proprietăților unor sisteme neconvenționale bazate pe utilizarea de compusi cu proprietăți de recunoaștere ionică și moleculară.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Fenomenul de recunoaștere ionică și moleculară; tipuri de interacțiuni implicate; factori termodinamici și cinetici.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.2. Recunoașterea moleculară: procesul ce implică legarea și selecția substraturilor	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.3. Grupări funcționale în recunoașterea moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.4. Modele de recunoașterea moleculară : modele lacăt-cheie și fit-indus	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.5. Recunoașterea moleculară între diferiți compuși: recunoașterea eter coroaă - ion metalic, Recunoașterea peptidă-antibiotic	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.6. Recunoașterea moleculară între diferiți compuși: Interacțiunea	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	

medicament-receptor, agoniști și antagoniști, control alosteric	Dezbateră.	
8.1.7. Recunoașterea macromoleculară statică și dinamică	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.8. Puncte de recunoaștere pe helixurile de acizi nucleici. Intercalare.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.9. Recunoașterea antigen anticorp	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.10. Metode de studiu a recunoașterii moleculare	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.11. Recunoașterea chimică. Foldameri. Colaps hidrofobic	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.12. Împachetarea și recunoașterea moleculară. Împachetarea datorată solventului. Împachetarea datorată formării de complecși cu transfer de sarcină	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.13. Recunoașterea gazdă-oaspete și ansambluri supramoleculare	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	
8.1.14. Recunoașterea dintre ioni metalici și achizi nucleici	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbateră.	

Bibliografie obligatorie

1. Lehn J.-M., **Supramolecular Chemistry**, VCH, Weinheim, **1995**.
2. Rotello V., Thayumanavan S., **Molecular Recognition and Polymers**, Wiley, NJ, **2008**.
3. Lockhart J. C., „Chemical Sensors”, în J.-M. Lehn (ed.), **Comprehensive Supramolecular Chemistry. Molecular Recognition: Receptors for Cationic Guests**, vol. 1, cap. 16, Pergamon, Oxford, **1996**.
4. Kaifer A., Kaifer M., **Supramolecular Electrochemistry**, Wiley-VCH, Weinheim, **1999**.
5. Bartsch R. A. J., Maeda M. (eds.), **Molecular and Ionic Recognition with Imprinted Polymers**, ACS Series, Washington DC, **1998**.
6. Mannold R., Kubinyi H., Folkers, G. (eds.), **Protein-Ligand Interactions: From Molecular Recognition to Drug Design**, Wiley, Weinheim, **2003**.

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Prezentarea tematicii pentru elaborarea de către studenți a referatelor bibliografice.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea.	4 h
8.2.2. Prezentarea de baze de date și programe specifice de vizualizare a structurilor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea.	4 h
8.2.3. Prezentarea de programe de docking și aplicații privind recunoașterea moleculară	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea.	4 h

8.2.4. Studii de caz de recunoaștere moleculară vizualizate prin intermediul unor programe specifice precum Pymol	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea.	4 h
8.2.5. Referate pe teme alese de cursanți. Studii de caz: analiza unor articole reprezentative din domeniu și folosirea unor programele specializate de studiere a recunoașterii moleculare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea.	4 h
8.2.6. Referate pe teme alese de cursanți. Studii de caz: analiza unor articole reprezentative din domeniu și folosirea unor programele specializate de studiere a recunoașterii moleculare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea.	4 h
8.2.7. Realizarea de către fiecare student a unor prezentări Powerpoint ce vor fi prezentate și discutate împreună cu toată grupa.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea.	4 h
Bibliografie 1. Programe specializate precum ViewerLite, PyMol, Chimera etc. 2. Baze de date științifice precum Scifinder, IsiKnowledge, RCSB, etc. 3. Articole științifice despre recunoaștere moleculară din jurnale de specialitate.		

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

Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina „**Materiale cu proprietăți de recunoaștere ionică și moleculară**” studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele din Suplimentul la diploma și calificările din ANC.

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 problematicei tratate la curs	Examen oral, indiferent dacă se va desfășura on-site sau on-line. Consta în prezentarea referatelor bibliografice. Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare, conform regulamentului ECST al UBB.	80%
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	Participarea la discuții.	20%
	Calitatea referatelor pregătite		
	Activitatea desfășurată în laborator		

10.6 Standard minim de performanță
<ul style="list-style-type: none">• Nota 5 (cinci) atât la activitatea de seminar/laborator, cât și la examen oral.• Prezentarea referatului bibliografic/studiului de caz.

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

12 aprilie 2021

Lect. dr. Alexandru Lupan

Lect. dr. Alexandru Lupan

Data avizării în
departament

12 aprilie 2021

Semnătura directorului de departament

Prof. habil. dr. ing. Graziella L. Turdean

