



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

FIȘA DISCIPLINEI

Designul biomaterialelor

Anul universitar 2025/2026

1. Date despre program

| | |
|--|---|
| 1.1. Instituția de învățământ superior | Universitatea Babeș-Bolyai din Cluj Napoca |
| 1.2. Facultatea | Chimie și Inginerie Chimică |
| 1.3. Departamentul | Chimie și Inginerie Chimică al liniei Maghiare |
| 1.4. Domeniul de studii | Inginerie chimică |
| 1.5. Ciclu de studii | Master |
| 1.6. Programul de studii / Calificarea | Chimia și ingineria nano- și biomaterialelor, inginer chimist |
| 1.7. Forma de învățământ | Învățământ cu frecvență |

2. Date despre disciplină

| | | | | | | | | |
|---|----|----------------|------------------------------|------------------------|---|--------------------------|-------------------|---------|
| 2.1. Denumirea disciplinei | | | Designul biomaterialelor | | | | Codul disciplinei | CMM8245 |
| 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 | II | 2.5. Semestrul | 3 | 2.6. Tipul de evaluare | E | 2.7. Regimul disciplinei | | DS |

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

| | | | | | |
|--|----|---------------------|----|----------------------------------|------------|
| 3.1. Număr de ore pe săptămână | 4 | din care: 3.2. curs | 2 | 3.3. seminar/ laborator/ proiect | 2 |
| 3.4. Total ore din planul de învățământ | 56 | din care: 3.5. curs | 28 | 3.6 seminar/laborator | 28 |
| Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI) | | | | | ore |
| 3.5.1. Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI) | | | | | 20 |
| 3.5.2. Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren | | | | | 20 |
| 3.5.3. Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri | | | | | 20 |
| 3.5.4. Tutoriat (consiliere profesională) | | | | | 6 |
| 3.5.5. Examinări | | | | | 3 |
| 3.5.6. Alte activități | | | | | - |
| 3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI) | | | | 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"> Sală cu proiector multimedia și ecran de proiecție, sau tablă interactivă. Studentii se prezintă la curs cu telefoanele mobile pe modul silențios. |
|--------------------------------|---|



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

| | |
|--|---|
| 5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului | <ul style="list-style-type: none"> • Sală cu proiector multimedia și ecran de proiecție, sau tablă interactivă. • Laborator dotat cu calculatoare și software specific. • Nu se permite întârzierea. |
|--|---|

6. Competențele specifice acumulate

| | |
|-----------------------------------|--|
| Competențe profesionale/esențiale | <ul style="list-style-type: none"> • Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul drug design și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională. • Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea și interpretarea interacțiunilor dintre substrat și receptor. • Analiza datelor și interpretarea corectă a rezultatelor teoretice obținute prin modelare. • Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor legate de designul produselor farmaceutice. • Utilizarea instrumentelor specializate de calcul tehnico-științific în drug design |
| Competențe transversale | <ul style="list-style-type: none"> • 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. • Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate. • 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 |

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

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

8. Conținuturi

| 8.1 Curs | Metode de predare | Observații |
|--|--|------------|
| 8.1.1 Prezentarea disciplinei, cunoștințelor și abilităților dobândite, cerințelor pentru promovare. Introducere în drug design și modelarea proteinelor. | Prelegerea; Explicația; Conversația | 2 ore |
| 8.1.2 Noțiuni recapitulative: aminoacizi, proteine, enzime. Farmacocinetică. Proprietăți moleculare. | Prelegerea; Explicația; Conversația | 2 ore |
| 8.1.3 Introducere în grafică moleculară. Programe pentru vizualizarea, editarea și analiza structurilor moleculelor. | Prelegerea; Explicația; Conversația | 2 ore |
| 8.1.4 Tipuri de interacțiuni între atomi. Câmpuri de forță. | Prelegerea; Explicația; Conversația | 2 ore |



UNIVERSITATEA BABES-BOLYAI
BABES-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABES-BOLYAI UNIVERSITAT
BABES-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

| | | |
|--|--|-------------------|
| 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 proteinelor pe baza de omologie. Alinierea proteinelor. | 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 Programe de modelare a proteinelor. | Prelegerea; Explicația; Conversația | 2 ore |
| Bibliografie 1. C.L. Nagy, Suport de curs în format electronic, 2020. 2. D.C. Young, Computational drug design. Wiley, 2009. 3. G. Schneider, K.H. Baringhaus, H. Kubinyi, Molecular design: Concepts and applications, Wiley, 2008. 4. H.D. Holtje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, Molecular Modeling, 3rd Ed., Wiley, 2008. 5. A. Leach, Molecular modelling: Principles and applications, 2nd Ed., Pearson Prentice-Hall, 2001. 6. C.J. Cramer, Essentials of computational chemistry: Theories and models, 2nd, Ed., Wiley, 2004. | | |
| 8.2 Seminar / laborator | Metode de predare | Observații |
| 8.2.1 Fișiere format structuri moleculare. Formatul SDF, PDB și SMILES. Prezentare programe de vizualizare și editare proteine. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.2 Analiza conformațională. Flexibilitate moleculară. Suprafața de potențial. Minimizarea energiei. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.3 Baza de date PDB. Structura cristalină a proteinelor. Analiza și corectarea structurilor cristaline. Factorul B | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.4 Formatul FASTA. Instrumente de alinierea secvențelor proteinelor. Identificare zimofori. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.5 Interacțiunea ligand-receptor. Diagrame de interacțiune 2D. Simulare QM/MM. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.6 Afinitatea de legare ligand-receptor. Andocarea moleculară rigidă. Funcții scor. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.7 Andocare flexibilă. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.8 Andocare indusă și andocare covalentă. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.9 Screening virtual bazat pe structura 3D a proteinei țintă. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.10 Screening virtual bazat pe structura liganzilor. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.11 Modele de farmacofori | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.12 Metode QSAR | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |



| | | |
|---|--|-------|
| 8.2.13 Aplicațiile dinamicii moleculare în drug design. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |
| 8.2.14 Modelarea structurii proteinei pe baza de omologie. Utilizare Swiss-Model. | Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme | 2 ore |

Bibliografie

1. D.C. Young, Computational drug design. 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. Leach, A. 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

Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina *Designul biomaterialelor*, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele din Suplimentul la diplomă 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 scris. | 50% |
| | Rezolvarea corectă a problemelor | | |
| 10.5 Seminar/laborator | Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator | Elaborarea și prezentarea unui referat pe o temă specifică disciplinei. | 40% |
| | Calitatea referatelor pregătite. Activitatea desfășurată în laborator | Activitatea desfășurată la seminar. | 10% |
| 10.6 Standard minim de performanță | | | |
| <ul style="list-style-type: none"> • Nota 5 (cinci) la examen conform baremului. • Cunoașterea noțiunilor fundamentale prezentate în cadrul disciplinei. • Accesul la examen este condiționat de prezența la seminar. • Caracterizarea proteinelor, caracterizarea interacțiunii receptor-ligand. | | | |

11. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)

| | | |
|--|--|--|
| | | |
|--|--|--|



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

**Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581**



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

Data completării:
15 martie 2025

Semnătura titularului de curs

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Semnătura titularului de seminar

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Data avizării în departament:
17 martie 2025

Semnătura directorului de departament

Prof. Habil. dr. ing. PAIZS Csaba