



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

Relatii structura-activitate biologica– CMM6644

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 linia maghiara
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclul de studii	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	Masterat didactic în Chimie
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei			Relatii structura-activitate biologica				Codul disciplinei	CMM6644
2.2. Titularul activităților de curs			Conf.Dr. Gabriel Katona					Etichetă ODD <div><div>4</div><div>EDUCATIE DE CALITATE</div><div></div></div>
2.3. Titularul activităților de seminar			Conf.Dr. Gabriel Katona					
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	2	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	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)					25
3.5.2. Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					12
3.5.3. Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					25
3.5.4. Tutoriat (consiliere profesională)					4
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">• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise• Nu va fi acceptată întârzierea
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	<ul style="list-style-type: none">• Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise• Studenții se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator.• Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune• Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării• Pentru predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi• Este interzis accesul cu mâncare în laborator

6. Competențele specifice acumulate¹

Competențe profesionale/esențiale	<ul style="list-style-type: none">• Operarea cu noțiuni de teoria grafurilor și chimie matematica avansata• Abilitatea de a utiliza diferitele tehnici de modelare a proprietatilor fizico-chimice si biologice ale compusilor organici, precum si prelucrarea statistica a datelor• Capacitatea de a utiliza noțiuni in vederea proiectarii de noi structuri biologic active
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none">• Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată.• Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse.• Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none">• dobândirea cunoștințelor teoretice privind modelarea moleculara, dezvoltarea capacității de rezolvare de probleme.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none">• Acumularea de cunoștințe teoretice de specialitate prin învățarea, înțelegerea și aplicarea conceptelor legate de chimia matematica reactie• Dezvoltarea capacitatii de analiza si sinteza a problemelor legate de relatii structura chimica-proprietati fizico-chimice si biologice



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

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Noțiuni introductive. Variabile.	Prelegerea. Explicația Conversația	
8.1.2. Regresii mono, bi- si multivariabile utilizate prelucrarea statistica a datelor	Prelegerea. Explicația Conversația	
8.1.3. Clasificarea si utilizarea modelelor QSPR	Prelegerea; Explicația Conversația	
8.1.4. Clasificarea si utilizarea modelelor QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.5. Indici complecsi	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.6. Descriptori fragmentali	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.7. Instrumente in proiectarea indicilor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.1.8. Modele avansate QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.9. Modele QSAR 3D	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.10. Evaluarea calitativa a modelelor QSPR si QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.11. Programe utilizate in modelare	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12. Analiza de componente principale, PCA	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Proiectarea structurilor biologic active	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Aplicatii QSPR, QSAR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie <ol style="list-style-type: none"> 1. M.V. Diudea, Topologie moleculară, Ed. Compres, 1995. 2. M. V. Diudea, (Ed.), <i>QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors</i>, NOVA SCIENCE, New York, 2001., 438p. 3. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, <i>Molecular Topology</i>, NOVA SCIENCE, New York, 2002. , 329p. 4. O. M. Minailiuc ans M. V. Diudea, TI-MTD Model. Applications in Molecular Design. In : M. V. Diudea, Ed., <i>QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors</i>. NOVA SCIENCE, New York, 2001, pp. 363-388. 5. M. Dehmer (Ed.), K. Varmuza (Ed.), D. Bonchev (Ed.), F. Emmert-Streib (Series Ed.), <i>Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR</i>, Wiley-Blackwell 2012 6. M. Karelson, <i>Molecular Descriptors in QSAR/QSPR</i>, 2000 7. I. Gutman (Ed.), B. Furtula (Ed.), <i>Novel Molecular Structure Descriptors - Theory and Applications, I and II</i>, University of Kragujevac, Kragujevac, Serbia, 2010 		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații



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

Utilizarea programelor de calcul	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția indicilor complecși	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția matricilor strat	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Analiza statistică	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția de modele QSPR	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția de modele QSAR	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Proiectare de structuri noi	Explicația; Problematizarea; Conversația;	

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 disciplină, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, 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 problematicei tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen.	80%
	Rezolvarea corectă a problemelor		



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

		Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar Calitatea referatelor pregătite Activitatea desfășurată la seminar	Referat	20%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului.Cunoașterea noțiunilor introductive; întocmirea corectă a unui bilanț de materiale (identificare sistem, subsisteme, scrierea corectă a ecuațiilor de bilanț de masă); elaborarea unui flux de separare (distilare simplă); elaborarea unei diagrame cascade pentru sinteza unui subsistem de schimbătoare de căldură.			

11. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)²

	Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă
	

Data completării:
20.03.2025

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

Data avizării în departament:
20.03.2025

Semnătura directorului de departament



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

Pain