

FIȘA DISCIPLINEI

Relația structură activitate biologică

Anul universitar 2026-2027

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. Ciclu de studii	Masterat
1.6. Programul de studii / Calificarea	Chimie Avansata (CA)/Chimist
1.7. Forma de învățământ	Frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Relația structură activitate biologică			Codul disciplinei	CMR7222
2.2. Titularul activităților de curs	Prof. Dr. Niculina Hădade				
2.3. Titularul activităților de seminar	Prof. Dr. Niculina Hădade				
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	Examen
2.7. Regimul disciplinei	Opțional	2.8. Tipul disciplinei		Disciplină de specializare (DS)	

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

3.1. Număr de ore pe săptămână	2	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
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					33
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat (consiliere profesională)					4
Examinări					2
Alte activități					2
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	Studentii vor consulta suportul de curs pus la dispoziția lor înaintea fiecărui curs Se vor pune la dispoziție materiale și informații pe platforme e-learning. Se va stimula participarea interactivă.
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	Prezența la activitățile de seminar și laborator este obligatorie în condițiile stabilite prin regulament.

	<p>Respectarea cu strictețe a normelor de protecție a muncii.</p> <p>Întocmirea fișei experimentului privind factorii de risc și măsurile de protecție.</p> <p>Echipamentul de laborator este obligatoriu.</p> <p>Sarcinile pe care trebuie să le îndeplinească studentul pe parcursul ședinței de laborator sunt bine definite și discutate cu studenții la începutul activității.</p> <p>Studenții au obligația de a pregăti lucrările de laborator și de a cunoaște modul de lucru, având la dispoziție materialul bibliografic necesar și referatul lucrării.</p>
--	---

6.1. Competențele dobândite în urma absolvirii programului de studii (se preiau din planul de învățământ)¹

Competențe profesionale	
Codul competenței	Competență
CP1	Dă dovadă de expertiză disciplinară
CP4	Gestionează procedurile de analiză chimică
CP5	Interacționează profesional în mediile de cercetare și profesionale
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT2	Lucrează în echipe
CT3	Gândește critic

6.2. Rezultatele învățării specifice programului de studii (se preiau din planul de învățământ)²

Rezultatele învățării vizate prin disciplină		
Codul competenței	Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)	Abilități academice specifice (Specific academic skills)
CP5, CT2	Absolventul înțelege norme, roluri și practici de lucru specifice mediilor academice și profesionale de cercetare, inclusiv standarde de comunicare și colaborare	Absolventul interacționează profesional în medii de cercetare și profesionale, oferă și utilizează feedback și își susține argumentat deciziile științifice în cadrul echipelor.
CP3, CT3	Absolventul înțelege criterii și standarde de calitate ale argumentării științifice (coerență, validitate, reproductibilitate, relevanță) utilizate în evaluarea concluziilor.	Absolventul evaluează critic rezultate și interpretări și comunică argumentat concluzii și recomandări în contexte academice/profesionale, adaptând mesajul la interlocutori și scop.

7. Rezultatele învățării specifice disciplinei

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
1. Explică principiile generale ale relației structură-activitate biologică și etapele principale ale designului rațional al medicamentelor.
2. Descrie sursele de compuși biologic activi, conceptul de compus prototip (lead compound) și principalele tehnici de screening utilizate pentru identificarea acestuia.

¹ Se vor prelua din Planul de învățământ al programului de studii acele competențe profesionale și/sau transversale la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa disciplinei. Pentru fiecare competență se va prelua întregul enunț, inclusiv codul competenței, cu formularea care apare în planul de învățământ, fără modificări. Dacă nu se preia nici o competență din oricare din cele două categorii, se șterge linia din tabel aferentă acelei categorii.

² Se menționează rezultatele învățării specifice programului de studiu la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa. Enunțurile, preluate fără modificări din Planul de învățământ în funcție de tipul disciplinei (DF/DS/DC) se trec în dreptul competenței asociate.

3. Explică strategiile de optimizare structurală a compușilor prototip, corelând modificările structurale cu activitatea biologică, selectivitatea, toxicitatea și proprietățile farmacocinetice.
4. Descrie tipurile principale de interacțiuni medicament-țintă biologică, rolul stereochemiei și mecanismele de acțiune implicate în interacțiunea compușilor activi cu receptorii, enzimele și acizii nucleici.
Abilități academice specifice (Specific academic skills)
1. Analizează critic relația dintre structura chimică și activitatea biologică pentru clase reprezentative de compuși bioactivi și medicamente.
2. Evaluează și compară strategii de identificare și optimizare a compușilor prototip utilizând date din literatura de specialitate, exemple experimentale și criterii relevante de validare.
3. Comunică și argumentează oral și în scris concluzii privind selecția, modificarea și evaluarea compușilor biologic activi, integrând feedbackul și colaborarea în activitățile de seminar și laborator.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare - învățare	Observații ³
8.1. Curs	Metode de predare	2 ore
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	2 ore
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	2 ore
8.1.3 Identificarea compusului biologic activ de bază (<i>lead compound</i>). Tehnici de <i>screening</i> .	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.4. Modificarea compusului biologic activ de bază în vederea îmbunătățirii proprietăților (activitate, toxicitate, absorbție, metabolizare, eliminare). Serii omoloage, Ramificarea, Bioizosteri.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.5. Modificarea compusului biologic activ de bază în vederea îmbunătățirii proprietăților (activitate, toxicitate, absorbție, metabolizare, eliminare). Transformarea ciclu-catena. Conformația biologic activă	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.6. Modificarea compusului biologic activ de bază în vederea îmbunătățirii proprietăților. Peptidomimetici	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.7. Interacțiunea medicament țintă biologică. Tipuri de interacțiuni implicate în compecșii medicament-țintă biologică. Recunoasterea moleculară	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.8. Interacțiunea medicament țintă biologică. Determinarea interacțiunilor medicament – receptor. Agoniști și antagoniști ai receptorilor.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.9. Interacțiunea medicament țintă biologică. Mecanisme. Considerații stereochemice	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore

³ De exemplu aspecte organizatorice, recomandări pentru studenți, aspecte specifice legate de curs/seminar cum ar fi invitarea unor practicieni în domeniu etc.

8.1.10. Inhibitori ireversibili ai enzimelor	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.11. Inhibitori reversibili ai enzimelor	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.12. Medicamente care interacționează cu acizii nucleici.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.13. Promedicamente de tip medicament-transporter.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.1.14. Sisteme macromoleculare de transport a medicamentelor.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire.	2 ore

Bibliografie

1. Suport de curs în format pdf pus la dispoziție de către titularul de disciplină.
2. 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**.
3. D Livingstone; Andrew M Davis *Drug design strategies: quantitative approaches*, Royal Society of Chemistry (Great Britain), Cambridge : RSC Pub., **2012**.
4. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, *Molecular Topology and Its Applications*, EFICON, București, **2006**.
5. Review-uri și articole din literatura științifică recentă (Wiley, ACS, RCS, Elsevier)

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare - învățare	Observații
8.2.1. Protecția muncii. Prezentarea tematicii lucrărilor de laborator.	Conversația, învățarea prin descoperire,	2 ore
8.2.2. Sinteza benzocainei în 4 etape plecând de la p-toluidină: Prepararea N-acetil p-toluidinei	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	4 ore
8.2.3. Sinteza benzocainei în 4 etape plecând de la p-toluidină: Prepararea acidului N-acetil p-aminobenzoic	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	4 ore
8.2.4. Sinteza benzocainei în 4 etape plecând de la p-toluidină: 3) Prepararea acidului p-aminobenzoic	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	4 ore
8.2.5. Sinteza benzocainei în 4 etape plecând de la p-toluidină: Prepararea și purificarea benzocainei	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	4 ore
8.2.6. Surse de compuși prototip. Metode și tehnici de screening. Aspirina, Peniciline	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme.	2 ore
8.2.7. Identificarea de compuși prototip pe bază de fragmente. Studiul complexilor prin spectrometrie de masă	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.2.8. Efectul modificărilor structurale asupra eficienței și proprietăților farmacocinetice. Taxolul	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.2.9. Optimizarea eficienței, selectivității, lipofilicității, toxicității. Calculul log P.	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.2.10. Metode computaționale în modificarea compusului prototip.	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore

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. K.C. Nicolaou and. T. Montagnon - *Molecules That Changed The World*, , Wiley-VCH, 2008.
3. Articole științifice în acord cu tematica cursului și a lucrărilor de laborator (colecția Wiley, ACS, Elsevier, RSC)
4. Referate de laborator puse la dispoziția studenților de către titularul de disciplină;

5. Cercasov, F. Dumitrașcu, C-V Popa, C. Drăchici, Compuși cu acțiune terapeutică naturali și de sinteză, Ed. Universității din București, 2004

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare ⁴	9.2 Metode de evaluare ⁵	9.3 Pondere din nota finală
9.4 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		
9.5 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	
9.6 Standard minim de promovare			
Obținerea notei 5 (cinci) la examen conform baremului, condiționarea intrării în examen de susținerea verificării de la seminar (cu minim 5(cinci)) Surse de compuși biologic activi, metode de screening, metode de validare a structurii, determinarea eficienței ligandului și a indicelui terapeutic Identificarea farmacoforului, grupărilor auxofore, a interacțiunilor medicament-țintă biologică. Minim nota 5 pentru fiecare laborator Minim nota 5 pentru fiecare referat.			

10. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)⁶

		Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă						
								
			X					

⁴ Criteriile de evaluare trebuie să reflecte direct rezultatele învățării vizate la nivel de program de studii, respectiv la nivel de disciplină. Mai concret, se evaluează achizițiile de învățare menționate în rezultatele anticipate ale învățării.

⁵ Se recomandă stabilirea atât a metodelor de evaluare finală, cât și a strategiei de evaluare pe parcurs.

⁶ Selectați o singură etichetă, cea care, în conformitate cu [Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic](#), se potrivește cel mai bine disciplinei. Dacă disciplina tratează tema dezvoltării durabile la modul general (de ex. prin prezentarea/introducerea cadrului general al dezvoltării durabile etc.) atunci se poate alocă eticheta generală de Dezvoltare Durabilă. Dacă niciuna dintre etichete nu descrie disciplina, selectați ultima opțiune: „Nu se aplică nici o etichetă”.

10 INEGALITĂȚI REDUSE 	11 ORASE ȘI COMUNITĂȚI DURABILE 	12 CONSUM ȘI PRODUȚIE RESPONSABILĂ 	13 ACȚIUNE CLIMATICĂ 	14 VIAȚĂ ACVATICĂ 	15 VIAȚĂ TERESTRĂ 	16 PAȚE, JUSTIȚIE ȘI INSTITUȚII EFICIENTE 	17 PARTENERIATE PENTRU REALIZAREA OBIECTIVELOR 	Nu se aplică nici o etichetă
								

Data completării:

17.04.2026

Semnătura titularului de curs

Prof. Dr. Niculina Hădade

Semnătura titularului de seminar

Prof. Dr. Niculina Hădade

Data avizării în departament:

24.04.2026

Semnătura directorului de departament

Prof. Dr. Monica Toșa