

## 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 și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclu de studii	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	Tehnici moderne de sinteză în chimie / master
1.7. Forma de învățământ	Cu frecvență

#### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Relația structură - activitate biologică			Codul disciplinei	CLM6644
2.2. Titularul activităților de curs	Conf.Dr. Katona Gabriel				
2.3. Titularul activităților de seminar/laborator	Conf.Dr. Katona Gabriel				
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	4	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	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
<b>Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)</b>					<b>ore</b>
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					30
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					15
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri (mai mare sau egal cu nr. total ore prevăzut în calendarul disciplinei pentru temele de control)					15
Tutoriat (consiliere profesională)					5
Examinări					4
Alte activități [de ex.: comunicare bidirecțională cu titularul de disciplină / tutorele]					0
<b>3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)</b>				<b>69</b>	
<b>3.8. Total ore pe semestru</b>				<b>125</b>	
<b>3.9. Numărul de credite</b>				<b>5</b>	

#### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	
4.2. de competențe	

#### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"><li>Echipament tehnic pentru prezentări (calculator, software adecvat, videoproiector / tablă inteligentă).</li><li>Studentii vor consulta suportul de curs pus la dispoziția lor înaintea fiecărui curs în format electronic.</li></ul> Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile pe modul silențios.
--------------------------------	--

5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Participarea la activitățile de seminar și de laborator este obligatorie, în condițiile regulamentului.</li> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile pe modul silențios. Nu va fi acceptată întârzierea.</li> <li>• Studenții se vor prezenta în laborator cu halat, mănuși, ochelari de protecție, cârpă de laborator.</li> <li>• Studenții vor respecta normele de protecție a muncii.</li> <li>• La începutul fiecărei ședințe de laborator, studenții vor face dovada cunoașterii factorilor de risc și a măsurilor de siguranță pentru substanțele cu care se lucrează, precum și a lucrării de laborator conform materialului bibliografic pus la dispoziție, prin completarea unui test.</li> <li>• Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune.</li> <li>• Pe parcursul ședinței de laborator, studenții vor nota observațiile asupra lucrării efectuate în caietul de laborator.</li> <li>• Predarea referatului de laborator se va face conform graficului stabilit la începutul semestrului.</li> </ul> <p>Este interzis accesul cu alimente în laborator.</p>
--	---

#### 6.1. Competențele dobândite în urma absolvirii programului de studii (se preiau din planul de învățământ)<sup>1</sup>

Competențe profesionale	
Codul competenței	Competență
CP1	Utilizarea avansată a conceptelor și principiilor fundamentale în sinteza chimică modernă.
CP2	Operarea cu echipamente de cercetare și tehnici instrumentale de înaltă performanță
CP5	Identificarea și definirea unui subiect de cercetare, elaborarea și punerea în practică a unui plan de realizare a obiectivelor propuse și valorificarea rezultatelor obținute
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT1	Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată.
CT2	Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse.

#### 6.2. Rezultatele învățării specifice programului de studii (se preiau din planul de învățământ)<sup>2</sup>

Rezultatele învățării vizate prin disciplină		
Codul competenței	Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)	Abilități academice specifice (Specific academic skills)
CP1	Cunoaște metodele avansate, teoriile și metodelor specifice chimiei și fizicii în cercetare	Își asumă responsabilitatea efectuării de analize și interpretării rezultatele obținute.
CP2	Cunoaște metodele de proiectare și conducere a experimentelor complexe folosind aparatură de înaltă performanță.	Își asumă întreaga responsabilitate pentru managementul fluxului experimental, garantând integritatea datelor și respectarea protocoalelor de siguranță în utilizarea echipamentelor de înaltă tehnologie.

<sup>1</sup> 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.

<sup>2</sup> 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.

<b>CP5</b>	Cunoaște metodele avansate de analiză și caracterizare a compușilor organici și anorganici	Aplică metode și tehnici moderne de analiză și caracterizare utilizate în laboratoare de chimie.
------------	--	--

**7. Rezultatele învățării specifice disciplinei** (derivate de fiecare titular de disciplină din grila competențelor și a rezultatelor învățării la nivel de program de studii)

<b>Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)</b>
1. Cunoaște metodele avansate, teoriile și metodelor specifice chimiei și fizicii în cercetare.
2. Cunoaște metodele de proiectare și conducere a experimentelor complexe folosind aparatură de înaltă performanță.
3. Cunoaște metodele avansate de analiză și caracterizare a compușilor organici și anorganici.
<b>Abilități academice specifice (Specific academic skills)</b>
CP1. Își asumă responsabilitatea efectuării de analize și interpretării rezultatele obținute.
CP2. Își asumă întreaga responsabilitate pentru managementul fluxului experimental, garantând integritatea datelor și respectarea protocoalelor de siguranță în utilizarea echipamentelor de înaltă tehnologie.
CP5. Își asumă responsabilitatea efectuării de analize și interpretării rezultatelor.

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare - învățare	Observații
8.1.1. Noțiuni introductive. Variabile.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.2. Regresii mono, bi- si multivariabile utilizate prelucrarea statistica a datelor	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.3. Clasificarea si utilizarea modelelor QSPR	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.4. Clasificarea si utilizarea modelelor QSAR	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.5. Indici complecsi	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.6. Descriptori fragmentali	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.7. Instrumente in proiectarea indicilor	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.8. Modele avansate QSAR	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.9. Modele QSAR 3D	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.10. Evaluarea calitativa a modelelor QSPR si QSAR	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.11. Programe utilizate in modelare	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea.	2 ore / săptămână
8.1.12. Analiza de componente principale, PCA	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.13. Proiectarea structurilor biologic active	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.14. Aplicatii QSPR, QSAR	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
<b>Bibliografie</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. M.V. Diudea, Topologie moleculară, Ed. Compres, 1995.</li> <li>2. M. V. Diudea, (Ed.), <i>QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors</i>, NOVA SCIENCE, New York, 2001., 438p.</li> <li>3. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, <i>Molecular Topology</i>, NOVA SCIENCE, New York, 2002., 329p.</li> <li>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.</li> <li>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</li> <li>6. M. Karelson, <i>Molecular Descriptors in QSAR/QSPR</i>, 2000</li> </ol>		

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		
<b>8.1 Seminar/Laborator</b>	<b>Metode de predare - învățare</b>	<b>Observații</b>
Utilizarea programelor de calcul	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția indicilor complecsi	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;	
<b>Bibliografie</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. M.V. Diudea, Topologie moleculară, Ed. Compres, 1995.</li> <li>2. M. V. Diudea, (Ed.), <i>QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors</i>, NOVA SCIENCE, New York, 2001., 438p.</li> <li>3. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, <i>Molecular Topology</i>, NOVA SCIENCE, New York, 2002., 329p.</li> <li>4. O. M. Minailiuc and 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.</li> <li>5. M. Dehmer (Ed.), K. Varmuza (Ed.), D. Bonchev (Ed.), F. Emmert-Streib (Series Ed.), <i>Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSPR/QSPR</i>, Wiley-Blackwell 2012</li> <li>6. M. Karelson, <i>Molecular Descriptors in QSAR/QSPR</i>, 2000</li> <li>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</li> </ol>		

## 9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare <sup>3</sup>	9.2 Metode de evaluare <sup>4</sup>	9.3 Pondere din nota finală
9.5 Curs	Examen	scris	80%
9.6. Seminar/Laborator	Colocviu	Scris/practic	20%
9.6 Standard minim de promovare			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Nota 5 (cinci)</li> <li>• Prezența la laborator/seminar în proporție de min. 90% condiționează accesul la examen</li> <li>• Prezentarea unui proiect digital realizat pe parcursul semestrului</li> <li>• Demonstrarea competențelor de bază în utilizarea instrumentelor digitale aplicate în chimie</li> </ul>			

## 10. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)<sup>5</sup>

	Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă
---	--

<sup>3</sup> 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.

<sup>4</sup> Se recomandă stabilirea atât a metodelor de evaluare finală, cât și a strategiei de evaluare pe parcurs.

<sup>5</sup> 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”.

								
								Nu se aplică nici o etichetă

Data completării:

17.04.2026

Semnătura titularului de curs

Conf.Dr. Katona Gabriel

Semnătura titularului de seminar

Conf.Dr. Katona Gabriel

Data avizării în departament:

27.04.2026

Semnătura directorului de departament

Prof. dr. ing. PAIZS Csaba