

FIȘA DISCIPLINEI

Bioinformatică structurală și modelare biomoleculară

Anul universitar 2026-2027

1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai
1.2. Facultatea	Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică
1.3. Departamentul	Chimie
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclu de studii	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	CHIMIE BIOLOGICĂ PENTRU ȘTIINȚELE VIEȚII ȘI ȘTIINȚE MEDICALE / CHEMIC BIOLOGY IN LIFE AND MEDICAL SCIENCES (CBSVSM)
1.7. Forma de învățământ	Frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Bioinformatică structurală și modelare biomoleculară			Codul disciplinei	CME6106
2.2. Titularul activităților de curs	Prof. Dr. Habil. Horia Banciu / CS I Dr. Vlad Cojocacru				
2.3. Titularul activităților de seminar					
2.4. Anul de studiu	1	2.5. Semestrul	1	2.6. Tipul de evaluare	Evaluare pe parcurs
2.7. Regimul disciplinei	Obligativu	2.8. Tipul disciplinei	Disciplină fundamentală (DF)		

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)					68 ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					15
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat (consiliere profesională)					8
Examinări					5
Alte activități					-
3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)				68	
3.8. Total ore pe semestru				126	
3.9. Numărul de credite				5	

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	Biochimie Moleculară și Biofizică, Biologie Moleculară și Celulară
4.2. de competențe	Cunostiințe computer de nivel mediu

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	Se va stimula participarea interactivă. Se vor pune la dispoziție materiale și informații utile pentru realizarea activităților. Cursul se va desfășura on-site, utilizarea telefonului sau a altor dispozitive electronice este permisă doar pentru activitățile din cadrul cursului.
5.2. de desfășurare a seminarului	Prezența la activitățile de seminar este obligatorie în condițiile stabilite prin regulament.

	Rezolvarea și predarea temelor de la seminar se realizează conform calendarului stabilit la începutul semestrului, de comun acord cadru didactic-studenți. Utilizarea telefonului sau a altor dispozitive electronice este permisă doar pentru activitățile din cadrul seminarului.
--	---

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

Competențe profesionale	
Codul competenței	Competență
CP1	Dezvoltarea capacității de a explica procese biologice fundamentale (replicare, transcriere, cataliză enzimatică) ca urmare a interacțiunilor biomacromoleculare într-un anumit context al vieții celulare. Abilitatea de a utiliza baze de date bioinformatic, instrumente de predicție, analiză și vizualizare pentru a obține o înțelegere aprofundată a structurii și funcțiilor biomacromoleculelor.
CP2	Dezvoltarea capacității de analiză, sinteză și comunicare a informațiilor științifice de specialitate. Development of the capacity for analysis, synthesis and communication of specialized scientific information.
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT3	Dobândirea informațiilor necesare/complementare asimilării conținutului disciplinelor Proteomică, Transcriptomică, Metabolomică, Genomică aplicată în sănătatea umană; proiect individual de bioinformatică. Realizarea unui proiect de cercetare cu tot ceea ce presupune de la utilizarea conceptelor specifice, selectarea și aplicarea metodelor de studiu, interpretarea datelor, până la comunicarea rezultatelor.

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)
CP1, CP2	1. Formularea soluțiilor de rezolvare a problemelor complexe ale biochimiei și utilizării chimiei în sistemele biologice pe baza cunoașterii, identificării și aplicării conceptelor, metodelor și teoriilor avansate din domeniul biochimiei	1. Aplicarea metodelor și tehnicilor moderne din domeniul chimiei și biochimiei în studiul sistemelor biologice.
CT3	1. Cunoașterea unor strategii de cercetare științifică, stabilirea programului experimentelor și simulărilor, explicarea și interpretarea rezultatelor pentru elaborarea proiectelor de cercetare	1. Utilizarea conceptelor fundamentale și aplicative de investigare științifică în scopul dezvoltării de proiecte de cercetare pentru dezvoltarea de noi produse/tehnologii cu aplicații practice

7. Rezultatele învățării specifice disciplinei

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
Caracterizarea structurală a biomoleculelor și complexelor biomoleculare.
Descrierea teoretică a principalelor metode utilizate în Bioinformatica Structurală (Modelare structurală, Simulări de dinamică moleculară, andocare moleculară).

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.

Cunoașterea mecanismelor de reglare a genelor și legătura dintre structura și funcția biomoleculelor.
Abilități academice specifice (Specific academic skills)
Vizualizarea structurilor biomoleculelor și sublinierea diverselor proprietăți structurale; efectuarea modelării structurale folosind o serie de metode disponibile; configurarea și efectuarea simulării de dinamică moleculară și de Molecular Docking; navigarea în sistemul de operare Linux. Scrierea de scripturi în diferite limbaje de programare pentru a vizualiza și analiza datele.
Derularea unui proiect de cercetare la scară mică; scrierea unui raport științific despre un proiect de cercetare conform unui șablon de jurnal predefinit; prezentarea unui articol științific colegilor.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Introducere în bioinformatica structurală: definiție, scopuri și aplicații.	Expunerea interactivă, prezentarea, explicația, exemple practice, discuții pe studii de caz	
8.1.2. Relația dintre secvență, structură și funcție la acizi nucleici și proteine.	Expunerea interactivă, prezentarea, explicația, exemple practice, discuții pe studii de caz	
8.1.3. Alinierea secvențelor. Baze de date utilizate în bioinformatica structurală.	Expunerea interactivă, prezentarea, explicația, exemple practice, discuții pe studii de caz	
8.1.4. Clasificarea proteinelor și baze de date dedicate.	Expunerea interactivă, prezentarea, explicația, exemple practice, discuții pe studii de caz	
8.1.5. Structuri macromoleculare: nivele de organizare a structurilor, generarea experimentală, vizualizarea și modelarea structurilor 3D pe baza datelor de secvență.	Expunerea interactivă, prezentarea, explicația, exemple practice, discuții pe studii de caz	
8.1.6. Strategii de analiză a structurilor 3D. Predicția structurilor secundare și terțiare și a funcțiilor biomacromoleculelor.	Expunerea interactivă, prezentarea, explicația, exemple practice, discuții pe studii de caz	
8.1.7. Fundamentele structurale ale dinamicii macromoleculare, specificității de legare și catalizei enzimatice.	Expunerea interactivă, prezentarea, explicația, exemple practice, discuții pe studii de caz	

Bibliografie

1. Eidhammer I, Jonassen I, Taylor W.R., *Protein bioinformatics: an algorithmic approach to sequence and structure analysis*. Chichester: John Wiley & Sons, 2004
2. Rigden D.J. *From Protein Structure to Function with Bioinformatics*: Springer; 2017
3. Keith J.M., *Bioinformatics*. Vol. 2: Structure, function, and applications. New York: Humana Press, 2017. In: *Bioinformatics*, vol. Vol. 2,
4. Gaspari Z., *Structural Bioinformatics*, Springer, 2020
5. Leach, A.R. *Molecular modelling: principles and applications*. 2nd edition, Pearson education, 2001.
6. Stryer L., *Biochemistry*. New York: W. H. Freeman and Company, 1995
7. Schlick T., *Molecular modeling and simulation: an interdisciplinary guide*. New York, Springer, 2010.
8. Xiong J., *Essential bioinformatics*. New York: Cambridge University Press, 2006
9. Ramachandran, K. I., Gopakumar, Deepa., *Computational Chemistry and Molecular Modeling: Principles and Applications*. Berlin, Springer-Verlag, 2008
10. Chatenay, D., *Multiple aspects of DNA and RNA: from biophysics to bioinformatics*. Amsterdam: Elsevier, 2005, URL: <http://www.sciencedirect.com/science/book/9780444520814>.

Titlurile (1-3, 5, 6, 8, 9, 10) sunt disponibile în formă printată la bibliotecile Facultății de Biologie și Geologie. Titlurile (2, 4, 7) vor fi puse la dispoziția studenților de către titular. Titlul (7) este disponibil sub formă printată la biblioteca Facultății de Chimie și Inginerie Chimică.

8.2 Laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Colectarea de date, analiza și vizualizarea: exerciții.	Expunerea interactivă, explicarea, conversația, demonstrația practică	
8.2.2. Modelarea structurilor tridimensionale a biomacromoleculilor: studii de caz și exerciții.	Expunerea interactivă, explicarea, conversația, studiu de caz, demonstrația practică	
8.2.3. Compararea structurilor 3D.	Expunerea interactivă, demonstrația practică	
8.2.4. Modelarea și vizualizarea dinamicii moleculare.	Expunerea interactivă, explicarea, conversația.	
8.2.5. Validarea, integrarea și compararea datelor.	Expunerea interactivă, conversația, demonstrația practică	
8.2.6. Evaluare finală a unui proiect individual de bioinformatică structurală	Studiu de caz, demonstrația practică	



Bibliografie

- *Resurse electronice, baze de date și instrumente bioinformatiche disponibile online.*
Uniprot (SwissProt, <https://www.uniprot.org/>), Protein Data Bank (<https://www.rcsb.org/>), SCOP data base (<https://scop.mrc-lmb.cam.ac.uk/>), CATH data base (<https://www.cathdb.info/>), AlphaFold data base (<https://alphafold.ebi.ac.uk/>)
- *Software*
SwissModel (<https://swissmodel.expasy.org/>), Modeller (<https://salilab.org/modeller/>), Pymol (<https://pymol.org/>), Visual Molecular Dynamics (<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>), Chimera (<https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>), AMBER (<http://ambermd.org/>), NAMD (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>), Gromacs (<https://www.gromacs.org/>), HADDOCK (<https://wenmr.science.uu.nl/haddock2.4/>), AUTODOCK (<https://autodock.scripps.edu/>), ROSETTA, (<https://www.rosettacommons.org/software>), AlphaFold (<https://www.deepmind.com/research/highlighted-research/alphafold>)

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare ³	9.2 Metode de evaluare ⁴	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Cunoașterea conceptelor și metodelor predate	Examen scris (grilă cu 0 sau mai multe răspunsuri corecte) - accesul la examen este condiționat de susținerea cu succes a testului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice, prezența de 80% la activitățile de seminar și laborator, și prezența de minim 40% la cursuri. Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECTS al UBB.	30%
9.5 Seminar/laborator	Evaluarea proiectului de cercetare	Raport scris (2 pagini) folosind un template al unei reviste de prestigiu.	30%
	Evaluarea aptitudinilor de prezentare	Prezentarea unui articol științific cu tema apropiată de temele și metodele predate la curs	30%
9.6 Standard minim de promovare			
Fiecare student trebuie să obțină minim 5 la examenul scris și colocviul oral. Pentru a obține nota minimă 5 studentul trebuie să demonstreze însușirea conceptelor de bază din tematica cursului și lucrărilor practice.			

10. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)⁵

		Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă
---	---	--

³ 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.

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

⁵ 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”.

1 FĂRA SĂRĂCIE 	2 FOAMETE „ZERO” 	3 SĂNĂTATE ȘI BUNĂSTARE 	4 EDUCATIE DE CALITATE 	5 EGALITATE DE GEN 	6 APĂ CURATĂ ȘI SANITATIE 	7 ENERGIE CURATĂ ȘI LA PREȚURI ACCESSIBILE 	8 MUNCĂ DECENTĂ ȘI CREȘTERE ECONOMICĂ 	9 INDUSTRIE, INOVAȚIE ȘI INFRASTRUCTURĂ 
								
10 INEGALITĂȚI REDUSE 	11 ORAȘE ȘI COMUNITĂȚI DURABILE 	12 CONSUM ȘI PRODUCȚIE RESPONSABILE 	13 ACȚIUNE CLIMATICĂ 	14 VIAȚĂ ACVATICĂ 	15 VIAȚĂ TERESTRĂ 	16 PACE, JUSTIȚIE ȘI INSTITUȚII EFICIENTE 	17 PARTENERIATE PENTRU REALIZAREA OBIECTIVELOR 	Nu se aplică nici o etichetă
								

Data completării:

21.04.2026

Semnătura titularului de curs

PROF. DR. HABIL. HORIA BANCIU/ CS.I DR. VLAD

COJOCARU

Semnătura titularului de seminar

PROF. DR. HABIL. HORIA BANCIU/ CS.I DR. VLAD

COJOCARU

Data avizării în departament:

24.04.2026

Semnătura directorului de departament

Prof. dr. eng. Monica-Ioana Toșa