

FIȘA DISCIPLINEI

Designul biomaterialelor

Anul universitar 2026/2027

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	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
Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					69 ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					20
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)					6
Examinări					3
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	Sală cu proiector multimedia și ecran de proiecție, sau tablă interactivă. Studenții se prezintă la curs cu telefoanele mobile pe modul silențios.
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	Sală cu proiector multimedia și ecran de proiecție, sau tablă interactivă. Laborator dotat cu calculatoare și software specific. Nu se permite întârzierea.

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

Competențe profesionale	
Codul competenței	Competență
CP1	Competențe de cunoaștere, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor avansate din domeniul chimiei și ingineriei nano- și biomaterialelor.
CP2	Capacitatea de a proiecta experimente și procese de obținere a nano- și biomaterialelor folosind instrumente asistate de calculator și ținând cont de aspectele dezvoltării durabile.
CP5	Identificarea, definirea și realizarea unor teme de cercetare în domeniul ingineriei de bio- și nanomateriale.
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT1	Abilitatea de a lucra autonom pentru elaborarea, programarea și implementarea cu inițiativă proprie a acțiunilor din planurile de cercetare dezvoltate.
CT2	Capacitatea de a conduce sau participa la echipe de cercetare internaționale în cadrul proiectelor de cercetare sau de transfer a rezultatelor cercetării către industrie sau societate.

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)
CP2	1. Realizarea unor tehnologii de obținere a bio- și nanomaterialelor, bazată pe instrumente CAD, precum și caracterizarea acestora.	1. Elaborarea proiectelor integrate, bazate pe instrumente CAD, pentru dezvoltarea creativă a tehnologiilor pentru bio- și nanomateriale.
CT2	2. Cunoașterea conceptelor, teoriilor specifice managementului resurselor și a calității pentru ingineria de proceselor bio- și nanotehnologice, în contextul dezvoltării durabile.	2. Utilizarea metodelor calitative și cantitative de evaluare a factorilor de risc, siguranță în operare și de management, pentru elaborarea proiectelor noi de management a resurselor și calității.

7. Rezultatele învățării specifice disciplinei

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
1. Studentul cunoaște principiile fundamentale ale proiectării medicamentelor (drug design) și cadrul teoretic al modelării proteinelor, precum și domeniile lor de aplicabilitate.
2. Studentul înțelege relațiile structură-funcție ale biomoleculelor (aminoacizi, proteine, enzime) și rolul acestora în procesele farmacocinetice.
3. Studentul cunoaște tipurile de interacțiuni moleculare, bazele câmpurilor de forță clasice și rolul acestora în simulările moleculare.
4. Studentul înțelege fundamentele teoretice ale minimizării energiei, dinamicii moleculare și analizei conformaționale, precum și principalele abordări computaționale utilizate.
5. Studentul cunoaște metodele moderne de cercetare computațională în drug design (andocare moleculară, modelare farmacoforică, metode QSAR/QSPR), precum și principiile de funcționare ale bazelor de date și aplicațiilor software specifice.
Abilități academice specifice (Specific academic skills)
1. Studentul este capabil să vizualizeze, editeze și analizeze structuri moleculare utilizând programe de grafică moleculară specializate.

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.

2. Studentul este capabil să realizeze minimizări de energie și să configureze, ruleze și interpreteze simulări de dinamică moleculară pentru sisteme moleculare.
3. Studentul este capabil să efectueze studii de andocare moleculară (rigidă și flexibilă) și să interpreteze critic rezultatele obținute (energii de legare, funcții scor).
4. Studentul este capabil să modeleze structuri proteice prin metode de omologie, incluzând alinierea secvențelor și evaluarea calității modelelor obținute.
5. Studentul este capabil să aplice metode de screening virtual (modelare farmacoforică, analize QSAR/QSPR) și să utilizeze eficient baze de date moleculare în scopuri de cercetare și dezvoltare.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare - învățare	Observații ³
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
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.

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

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare - învățare	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. Evaluare





























Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare ⁴	9.2 Metode de evaluare ⁵	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Examen scris.	50%
	Rezolvarea corectă a problemelor		

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.

9.5 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%
9.6 Standard minim de promovare			
<ul style="list-style-type: none"> Obținerea notei minime de promovare (5), în conformitate cu baremul de evaluare. Accesul la examen este condiționat de prezența la seminar. Cunoașterea noțiunilor fundamentale prezentate în cadrul disciplinei: caracterizarea proteinelor, caracterizarea interacțiunii receptor-ligand. 			

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

		Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă						
								
								Nu se aplică nici o etichetă
								

Data completării:

20.04.2026

Semnătura titularului de curs

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Semnătura titularului de seminar

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Data avizării în departament:

24.04.2026

Semnătura directorului de departament

Prof. Habil. dr. ing. PAIZS Csaba

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”.