ANEXA 4

**FIŞA DISCIPLINEI**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Universitatea** | Babeș-Bolyai | | | | | | | | | | | |
| Facultatea | Chimie și Inginerie Chimică | | | | | | | | | | | |
| Specializarea | Doctorat în Chimie | | | | | | | | | | | |
| **I.** | | | | | | | | | | | | |
| **Denumire disciplină** | | | Modelare moleculară | | | | | | **Categoria** (DF/DD/DS/DC): DS | | | |
| **Structură disciplină** (Nr. ore săptămânal) | | | | | | | | | | | | |
| **II.** | | | | | | | | | | | | |
| Semestrul | Curs | | | | Seminar | | Laborator | | | Proiect | | |
| 2 | 1 | | | | - | | 1 | | | 1 | | |
| **III.** | | | | | | | | | | | | |
| **Statut disciplină** | | Obligatorie | | | | Opţională | | | | Facultativă | | |
| (marchează cu X) | |  | | | | x | | | |  | | |
| **IV.** | | | | | | | | | | | | |
| **Titular disciplină** | | | | | | | | | | | | |
|  | | | | Curs | | | Seminar | Laborator | | | Proiect | |
| Numele şi prenumele | | | | JÄNTSCHI Lorentz | | | - | JÄNTSCHI Lorentz | | | JÄNTSCHI Lorentz | |
| Instituţia | | | | UBB Cluj | | | - | UBB Cluj | | | UBB Cluj | |
| Departament | | | | SDC | | | - | SDC | | | SDC | |
| Titlul ştiinţific | | | | doctor | | | - | doctor | | | doctor | |
| Gradul didactic | | | | profesor | | | - | profesor | | | profesor | |
| Încadrarea | | | | Asociat | | | - | Asociat | | | Asociat | |
| Vârsta | | | | 46 | | | - | 46 | | | 46 | |
| **V.** | | | | | | | | | | | | |
| **Obiectivele disciplinei** (curs şi aplicaţii) (maxim 5 rânduri, în corelare cu obiectivele şi misiunea specializării)  o Formarea priceperilor şi deprinderilor de utilizare a principiului parsimoniei în elaborarea şi  utilizarea modelelor de structură moleculară şi proces biochimic;  o Formarea priceperilor şi deprinderilor de realizare a unei analize de corelaţie şi de regresie structură-  activitate pentru o clasă de compuşi;  o Dezvoltarea abilităţilor de manipulare a bazelor de date de modelare moleculară; o Dezvoltarea abilităţilor de utilizare a programelor de modelare moleculară. | | | | | | | | | | | | |
| **VI.** | | | | | | | | | | | | |
| **Conţinutul disciplinei** | | | | | | | | | | | | **Ore/săpt.** |
| **VI.1. Curs (capitole/subcapitole)** | | | | | | | | | | | | **12(12×1)** |
| **Curs 1. Cap 1. Structura moleculară. §1.1.** Formule chimice: formula brută, formula moleculară, formula structurală; | | | | | | | | | | | | 1 |
| **Curs 2. Cap 1. Structura moleculară. §1.2.** Structura moleculară: primară, secundară, terţiară, cuaternară; | | | | | | | | | | | | 1 |
| **Curs 3. Cap 2. Modele moleculare. §2.1.** Topologie moleculară, geometrie moleculară; | | | | | | | | | | | | 1 |
| **Curs 4. Cap 2. Modele moleculare. §2.2.** Teoria grafurilor chimice: grafuri, matrici, invarianţi, polinoame; | | | | | | | | | | | | 1 |
| **Curs 5. Cap 3. Modele de proces. §3.1.** Teoria seturilor moleculare: mulţimi, grafuri de reacţie; | | | | | | | | | | | | 1 |
| **Curs 6. Cap 3. Modele de proces. §3.2**. Modele fizice de interacţiune: Schrödinger, Coulomb, Newton, forţe nucleare, câmp, potenţial, energie; | | | | | | | | | | | | 1 |
| **Curs 7. Cap 4. Proprietăţi moleculare. §4.1.** Proprietăţi atomice: număr atomic, masă atomică, electronegativitate, sarcină parţială, etc.; | | | | | | | | | | | | 1 |

|  |  |
| --- | --- |
| **Curs 8. Cap 4. Proprietăţi moleculare. §4.2.** Proprietăţi şi activităţi moleculare: fizice (temperatură de topire şi fierbere, constantă de ionizare, etc.), chimice (reactivitate, timp de retenţie, etc.) şi biologice (coeficient de partiţie octanol/apă, activitate erbicidă, etc.); | 1 |
| **Curs 9. Cap 5. Energia şi entropia moleculară. §5.1.** Entropia: Hartley, Shanon, Renyi; | 1 |
| **Curs 10. Cap 5. Energia şi entropia moleculară. §5.2.** Potenţialul Lennard-Jones, minimizarea energiei potenţiale; | 1 |
| **Curs 11. Cap 6. Analiza de corelaţie şi regresie. §6.1.** Analiza de corelaţie a mărimilor cantitative şi calitative: Pearson, Spearman, Kendall, Goodman-Kruskal; | 1 |
| **Curs 12. Cap 6. Analiza de corelaţie şi regresie. §6.2.** Analiza de regresie: liniară simplă, multiplă, analiza de componente principale, analiza de componente dominante, analiza factorilor; | 1 |
| **VI.2. Seminar** | - |
| **VI.3. Lucrări de laborator** | **12(12×1)** |
| **L1.** ChemWindow - Program pentru reprezentarea structurii moleculare 2D - Utilizarea pentru reprezentarea acizilor organici; | 1 |
| **L2.** ChemOffice - Program pentru reprezentarea structurii moleculare 2D - Utilizarea pentru reprezentarea aminelor; | 1 |
| **L3.** HyperChem - Program pentru reprezentarea structurii moleculare 3D - Utilizare pentru reprezentarea aminoacizilor; | 1 |
| **L4.** Molecular Modeling Pro - Program pentru reprezentarea structurii moleculare 3D - Utilizare pentru reprezentarea zaharurilor; | 1 |
| **L5.** deMon2k, GAMESS, MOLDEN, MOPAC, MPQC, NWChem, Octopus - Programe pentru optimizarea geometriei moleculare - Utilizare pentru optimizarea geometriei dipeptidelor; | 1 |
| **L6.** deMon2k, GAMESS, MOLDEN, MOPAC, MPQC, NWChem, Octopus - Programe pentru optimizarea geometriei moleculare - Utilizare pentru optimizarea geometriei unei serii de esteri; | 1 |
| **L7.** ChemFinder, PubChem - Baze de date cu compuşi chimici - Utilizarea pentru căutarea  şi caracterizarea erbicidelor organofosforice; | 1 |
| **L8.** Belstein, DrugBank, ChemSpider - Baze de date cu compuşi chimici - Utilizarea pentru căutarea şi caracterizarea eterilor volatili; | 1 |
| **L9.** Dragon - Program pentru topologie moleculară - Utilizarea pentru analiza alcanilor; | 1 |
| **L10.** Topocluj - Program pentru topologie moleculară - Utilizarea pentru analiza compuşilor cu heterocicluri; | 1 |
| **L11.** FPIF, MDFV și MDF - Programe pentru geometrie moleculară - Utilizarea pentru analiza tripeptidelor și compușilor aromatici policiclici; | 1 |
| **L12.** Statistica, SPSS, Excell, http://l.academicdirect.org/Statistics/: Programe pentru analiza de corelaţie şi regresie - Utilizarea pentru analiza bifenililor policloruraţi; | 1 |
| **VI.4. Tematică proiect** | **12 (6×2)** |
| **P1.** Matricea de adiacenţă în grafuri şi mărimile derivate ale acesteia (invarianţi, polinoame) - Utilizarea acesteia în descrierea bioacumulării compuşilor chimici în organismele marine; | 2 |
| **P2.** Matricea de incidenţă în grafuri şi mărimile derivate ale acesteia (invarianţi, polinoame) - Utilizarea acesteia în descrierea bioacumulării compuşilor chimici în plante alogame; | 2 |
| **P3.** Matricea de distanţă în grafuri şi mărimile derivate ale acesteia (invarianţi, polinoame) - Utilizarea acesteia în descrierea bioacumulării compuşilor chimici în plante alostere; | 2 |
| **P4.** Matricea de detur în grafuri şi mărimile derivate ale acesteia (invarianţi, polinoame) - Utilizarea acesteia în descrierea bioacumulării compuşilor chimici în plante alogame; | 2 |
| **P5.** Utilizarea coeficienţilor de corelaţie a rangurilor (Pearson, Spearman, Kendall, Goodman-Kruskal) în analiza gradului de dulce la zaharuri; | 2 |
| **P6.** Verificarea ipotezelor statistice de distribuţie normală pentru familia de descriptori moleculari MDF ce caracterizează toxicitatea relativă a unei clase de para-fenoli; | 2 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **VII. Bibliografie** | | |
| 1. Diudea MV, Gutman I, Jäntschi L. Molecular Topology. Nova Science, Huntington, NY, USA, 2001 (Ed. I), 2002 (Ed. II), 332 p. online: http://lori.academicdirect.org/books/work\_list.php?user=lori&id=102  2. Ungureşan ML, Jäntschi L, Gligor DM. Aplicaţii educaţionale de chimie pe calculator. MediaMira, Cluj-Napoca, 2004, 250p. online: http://lori.academicdirect.org/books/work\_list.php?user=lori&id=115  3. Jäntschi L. Microbiologie, toxicologie şi studii fitosanitare, AcademicDirect, Cluj-Napoca, 2005, 75  p. online: http://lori.academicdirect.org/books/work\_list.php?user=lori&id=116  4. Bolboacă SD, Jäntschi L. How Good the Characteristic Polynomial Can Be for Correlations?. Int J Mol Sci 2007;8:335-345, online: http://lori.academicdirect.org/articles/work\_list.php?user=lori&id=128  5. Bolboacă SD, Jäntschi L. Pearson Versus Spearman, Kendall's Tau Correlation Analysis on Structure-Activity Relationships of Biologic Active Compounds, Leonardo J Sci 2006;9:179-200, online: http://lori.academicdirect.org/articles/work\_list.php?user=lori&id=58  6. Jäntschi L, Bolboacă SD. The Jungle of Linear Regression Revisited. Leonardo El J Pract Technol  2007;10:169-187, online: http://lori.academicdirect.org/articles/work\_list.php?user=lori&id=130  7. Jäntschi L, Bolboacă SD. Results from the Use of Molecular Descriptors Family on Structure Property/Activity Relationships. Int J Mol Sci 2007;8:189-203, online: http://lori.academicdirect.org/articles/work\_list.php?user=lori&id=121  8. Librăria de soft http://l.academicdirect.org  Cursurile şi materialele afişate pe Website-ul disciplinei Orice sursa de specialitate, avizată ştiinţific | | |
| **VIII. Metode didactice folosite** | | |
| Prezentare interactivă folosind video-proiectorul | | Curs |
| - | | Seminar |
| Experimente individuale sau în grupuri mici de studenţi (maxim 3) de modelare moleculară folosind protocol de lucru | | Laborator |
| Activitate individuală de cercetare pe teme prestabilite finalizată cu susţinere de proiect de disciplină pe bază de protocol de cercetare | | Proiect |
| **IX. Forme de evaluare** | | |
| **Activitate** | **Tip evaluare** | **Pondere** |
| Curs | Examen tip test grilă | 30% |
| Laborator | Colocviu | 35% |
| Proiect | Referat | 35% |

Data: 12.05.2021

Titular curs,

Prof. Lorentz JÄNTSCHI

**FIŞĂ LABORATOR DIDACTIC**

1. Denumire laborator: Modelare matematică şi computaţională în biologie şi chimie

2. Disciplină deservită: Modelare moleculară

3. Locaţie (corp clădire, sala): B.-dul Muncii 1034-105, Sala C500, C501 & C502

4. Număr de locuri (studenţi): 20

5. Suprafaţa: 65 m2

6. Dotare

Tehnică de calcul:

|  |  |
| --- | --- |
| Server baze de date |  IP: 193.226.7.200;   Suport: MySQL;   Conectivitate:  o Internet;  o IP intranet 172.27.211.4 (mdfv) - cca. 900Gb;  o IP intranet 172.27.211.5 (sensors) - cca. 500Gb;   Achiziţie: 2006; |
| Server modelare moleculară |  IP: 193.226.7.203;   Suport: PHP;   Conectivitate:  o Internet;  o IP intranet 172.27.211.3 (comput) - 8xCPU P4,  32Gb RAM;  o IP intranet 172.27.211.4 (mdvf) - 8xCPU P4,  32Gb RAM;   Achiziţie: 2006; |
| Server web |  IP: 193.226.7.211;   Suport: Apache;   Conectivitate:  o Internet;  o Bandă intranet 172.27.211.2-20;   Achiziţie: 2008; |
| Sisteme de deservire |  IP intranet 172.27.211.3 (comput);  o Suport: FreeBSD (Unix);  o Achiziţie: 2008;   IP intranet 172.27.211.4 (mdfv);  o Suport: FreeBSD (Unix);  o Achiziţie: 2008;   IP intranet 172.27.211.5 (sensors);  o Suport: FreeBSD (Unix);  o Achiziţie: 2008; |
| Reţea de calculatoare de birou |  Suport Hard: 10 calculatoare model P4   Achiziţie: 2005;   Suport Soft:  o Software de operare Windows;  o Software de birotică Office;  o Software dedicat (vezi mai jos);   Conectivitate: Internet; |
| Software dedicat |  Statistica (achiziţie 2008);   SPSS (achiziţie 2008);   Molecular Modeling Pro (achiziţie 2008);   ChemOffice (achiziţie 2008); |

 HyperChem (achiziţie 2008);

 Dragon (achiziţie 2008);

 RasMol (freeware);

 deMon2k (freeware);

 GAMESS (freeware);

 MOLDEN (freeware);

 MOPAC (freeware);

 MPQC (freeware);

 NWChem (freeware);

 Octopus (freeware);

 Clustal X (freeware);

 GABRIEL (freeware);

 GAL (freeware);

 GAML (freeware);

 GARLI (freeware);

 GDE (freeware);

 GOAL (freeware);

 LamarckianGA (freeware);

 MacClade (freeware);

 MEGA (freeware);

 Mesquite (freeware);

 metaGA (freeware);

 ModelTest (freeware);

 MrBayes (freeware);

 MS BLAST (freeware);

 NCBI BLAST (freeware);

 PAUP\* (freeware);

 r8s (freeware);

 RAGA (freeware);

 SAGA (freeware);

 S-System (freeware);

Data: 1.1.2019

Nume titular disciplină, Prof. Lorentz JÄNTSCHI Semnătura