

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea de Vest din Timișoara
1.2 Facultatea / Departamentul	Chimie, Biologie, Geografie / Biologie-Chimie
1.3 Catedra	Biologie-Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimie
1.7 Cod Curs/Planul de învățământ	CBGBCC55

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Chimia medicamentelor: relația structura-activitate biologică						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. univ. dr. dr.-habil. MIHAI V. PUTZ						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. univ. dr. dr.-habil. MIHAI V. PUTZ						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	2	2.6 Tipul de evaluare	C	2.7 Regimul disciplinei	DS/DOP

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	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	48	din care: 3.5 curs	24	3.6 seminar/laborator	24
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					12
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate / pe teren					11
Pregătire seminarii / laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					9
Tutoriat					4
Examinări					10
Alte activități (traduceri, conspecte, conferințe studentesti, prezenta la evenimente științifice UVT, vizite ghidate la institute/laboratoare de cercetare în chimie-fizica structurala, voluntariat în popularizarea științei, etc.)					6
3.7 Total ore studiu individual	52				
3.8 Total ore pe semestru	100				
3.9 Numărul de credite	4				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> Chimie Cuantică, Structura și proprietățile moleculelor, Matematică, Fizică
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Cunoștințe de limba Engleză și de informatică

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Sală curs (optional si On-line sincron)
5.2 de desfășurare a seminarului/laboratorului (fata-in-fata)	<ul style="list-style-type: none"> Sală de seminar, retea de conexiuni la computere/laptop, acces internet
5.3 Documentarea activităților on-line	<ul style="list-style-type: none"> Este recomandat ca Studenții să aibă un instrument de accesare digitală on-line/web în vederea urmăririi interactive a materialelor digitale pe toată durata activității didactice Accesarea materialelor activităților didactice se va face prin pagina specifică de pe Classroom (cu link conectare on-line de tip meet pentru prezentarea sincronă a materialelor digitale)

6. Obiectivele disciplinei - rezultate așteptate ale învățării la formarea cărora contribuie parcurgerea și promovarea disciplinei

Cunoștințe	<ul style="list-style-type: none"> C1 Cunoașterea și înțelegerea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor și modelelor elementare privitoare la compoziții chimice, biochimice și farmaceutice. C2 Explicarea și interpretarea unor noțiuni fundamentale, concepte, teorii, modele și proprietăți.
Abilități	<ul style="list-style-type: none"> A2 Reflecția critică și constructivă pentru rezolvarea de probleme și situații în activitatea de analiză-cercetare și la locul de muncă;
Responsabilitate și autonomie	<ul style="list-style-type: none"> RA3 Capacitatea de a lucra în echipă sau în grup.

7. Conținuturi

(Tematica poate fi actualizată din partea cadrului didactic, în relație cu studenții curenți, pe parcurs)

7.1 Curs	Metode de predare	Observații
Controlul cuantic al activității biologice. Reacții alosterice. Activatori și inhibitori. Modelarea cineticilor biochimice prin tunelarea cuantică a grupărilor protonice.	<ul style="list-style-type: none"> Prezentări orale Prelegere participativă Dezbaterea Demonstrația logică, matematică, fizică, și computațională Exemplificarea 	<p>Se combină metodele creative de predare interactivă:</p> <ul style="list-style-type: none"> <i>Brainstorming sau asaltul de idei:</i> formularea a cât mai multor idei – oricât de fanteziste ar putea părea acestea – ca răspuns la o situație enunțată, după principiul „cantitatea generează calitatea”.
Interacții specifice modelate QSAR I. Filosofia QSAR.		

Formularea problemei. Soluția standard. Cazul acetilcolinesterazei.		
Interacții specifice modelate QSAR II. Formalismul probabilistic.		
Interacții specifice modelate QSAR III. Fragmentare și defragmentare moleculară.		
Interacții specifice modelate QSAR IV. Statistica activității biologice.		
Interacții specifice modelate QSAR V. Ecuația QSAR și principiul cuantic al superpoziției.		
Interacții specifice modelate QSAR VI. Principiile ecotoxicologice ale aplicării ecuației QSAR.		
Interacții specifice la nivel ecotoxicologic. Principiul lui Fisher. Holism și reduționism în sistemele biologice versus reactivitatea globală și locală în sistemele chimice. Interacția chimico-biologică. Paradigma cuantică a legării chimice ligand-receptor pentru legarea bio- și eco-logică specifică efector-receptor.		
		<ul style="list-style-type: none"> • <i>Bulgărele de zăpadă</i>: reducerea numărului de elemente, aspecte, fațete ale unei probleme pentru focalizarea asupra celor esențiale • <i>Carduri de aplicații</i>: După ce studenții au fost introduși într-un principiu, generalizare, teorie sau procedură, studenții primesc cartonașe pe care să noteze cel puțin o posibilă aplicare a ceea ce au învățat în lumea reală. • <i>Ciorchinele</i>: metodă de brainstorming neliniară care stimulează găsirea conexiunilor dintre idei. • <i>Diagrama os de pește</i> (sau echivalent): problema ce trebuie rezolvată este notată în „capul” peștelui, apoi sunt înșirate cauzele, de-a lungul „oaselor” și împărțite pe categorii. Cauzele suplimentare pot fi adăugate pe noi ramificații. • <i>PBL - Problem Based Learning</i>: tema este prezentată sub forma unei probleme de rezolvat de către studenți care au mijloacele și informațiile necesare la dispoziție. Profesorul acționează ca un ghid și se abține să ofere un răspuns gata fabricat. • <i>Pictionary</i>: Profesorul notează pe bilețele concepte importante, un student va extrage un bilețel și va trebui să reprezinte grafic conceptul, restul grupei avînd sarcina de a recunoaște despre ce este vorba.

Bibliografie

- **Putz M.V.** (2016) QUANTUM NANOCHEMISTRY. A Fully Integrated Approach: Vol V. QUANTUM STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP (Qu-SAR) Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA, pp. 622+index; ISBN: 978-1-771881-37-1; URL: <http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=9781771881371>
- Silverman R.B. (2004) THE ORGANIC CHEMISTRY OF DRUG DESIGN AND DRUG ACTION (2nd Edition). Elsevier- Academic Press, Amsterdam.
- Copeland R.A. (2000) ENZYMES-A PRACTICAL INTRODUCTION TO STRUCTURE, MECHANISM, AND DATA ANALYSIS (second edition), Wiley-VCH, New York.
- Chiriac A., Ciubotariu D., Simon Z. (eds.) (1996) RELAȚII CANTITATIVE STRUCTURĂ CHIMICĂ-ACTIVITATE BIOLOGICĂ (QSAR). Metoda MTD, Editura Mirton, Timișoara.
- Cantor C.R., Schimmel P.R. (1980) BIOPHYSICAL CHEMISTRY. III. THE BEHAVIOR OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES, W.H. Freeman and Co., San Francisco. Balaban A.T. (ed.) (1976) CHEMICAL APPLICATIONS OF GRAPH THEORY, Academic Press, London.

7.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații		
Interacții specifice la nivel farmacoforic. Design molecular	<ul style="list-style-type: none"> • Prezentari orale • Experimente de calculator individuale • Rezolvări de probleme • Eseuri creative, formative 	Se combină metodele creative de seminarizare interactivă: <ul style="list-style-type: none"> • <i>Discurs improvizat</i>: Studenții scriu cuvinte cheie, iar acestea se pun într-un bol. Un student (auto)desemnat va extrage un bilețel și va trebui să își construiască un monolog pe care să îl expună în 30 de secunde. • <i>Discuția de tip panel</i> (sau echivalent): utilizarea unui grup mic (de șase persoane) de persoane competente și/sau reprezentative care formează panelul. Aceste persoane analizează și dezbat o problemă, în timp ce profesorul intervine prin mesaje scrise. • <i>Eseul de 5 minute</i> (la început și finalul orei). La finalul orei scrie un lucru pe care l-au învățat din cursul respective și să formuleze o întrebare pe care o mai au în legătura cu acesta (acestea vor fi ulterior dezbătute, folosite la selecția studenților pentru cercetare științifică, cooptare în grupuri de cercetare, etc.) • <i>Mini-prezentări</i>: studentul se folosește de mijloacele audio-vizuale pentru a prezenta un subiect pe care l-a studiat în prealabil sau chiar l-a învățat. Ceilalți colegi trebuie să întrețină discuția punând întrebări și adăugând informații suplimentare. 		
Principiile EU-QSAR I. Principiul definirii end-pointului. Semnificația EC50, NOEL, narcoza polara, etc.				
Principiile EU-QSAR II. Principiul definirii aplicării unui algoritm non-ambiguu. QSAR ortogonal. Ortogonalizarea Randic. Ortogonalizarea Lowdin.				
Principiile EU-QSAR III. Principiul domeniului de definiție al seriei de compuși analizați. Spectral-SAR				
Principiile EU-QSAR IV. Principiul robusteții ecuației QSAR. Indicele de corelare algebric. QSAR vs. Spectral-SAR				
Principiile EU-QSAR V. Principiul mecanicist în analiza QSAR. Avantajul abordării algebrice Spectral-SAR				
Bibliografie				
<ul style="list-style-type: none"> • Putz M.V. (2020) (Editor) <i>New Frontiers in Nanochemistry: Concepts, Theories, and Trends, 3-Volume Set: Volume 1: Structural Nanochemistry. Volume 2: Topological Nanochemistry. Volume 3: Sustainable Nanochemistry.</i> Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA. pp. 1479+index; ISBN: 978-1-771887-80-9; URL: http://www.appleacademicpress.com/new-frontiers-in-nanochemistry-concepts-theories-and-trends-3-volume-set-volume-1-structural-nanochemistrybrvolume-2-topological-nanochemistrybrvolume-3-sustainable-nanochemistry/9781771887809 • Putz M.V.(2013) Spectral-diagonal approach of structure-property (activity) relationships: SD-QSP(A)R. The general formalism, <i>Int. J. Chem. Model.</i> 5(2/3):357-367. 				

- **Putz M.V.** (2013) Chemical orthogonal spaces (COSs): from structure to reactivity to biological activity. *Int. J. Chem. Model.* 5(1):1-33.
- **Putz M.V.;** Putz A.M. (2013) DFT Chemical Reactivity Driven by Biological Activity: Applications for the Toxicological Fate of Chlorinated PAHs. *Structure and Bonding* 150 (2013) 181–232 (DOI: 10.1007/978-3-642-32750-6_6)
- **Putz M.V.;** Dudaș N.A. (2013) Variational principles for mechanistic quantitative structure–activity relationship (QSAR) studies: application on uracil derivatives’ anti-HIV action. *Struct. Chem.* 24(6):1873-1893 (DOI: 10.1007/s11224-013-0249-6).
- **Putz M.V.;** Dudaș N.A. (2013) Determining chemical reactivity driving biological activity from SMILES transformations: The bonding mechanism of anti-HIV pyrimidines. *Molecules* 18(8):9061-9116 (DOI: 10.3390/molecules18089061).
- **Putz M.V.;** Mingos D.M.P., Eds. (2013) APPLICATIONS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY TO BIOLOGICAL AND BIOINORGANIC CHEMISTRY, Structure and Bonding Series Vol. 150, Springer Verlag, Heidelberg-Berlin.
- **Putz M.V.;** Tudoran M.A.; Putz A.M. (2013) **Structure properties and chemical-bio/ecological of PAH interactions: from synthesis to cosmic spectral lines, nanochemistry, and lipophilicity-driven reactivity.** *Curr. Org. Chem.* 17(23):2845-2871 (DOI: 10.2174/13852728113179990130).
- **Putz M.V.;** Ori O.; Cataldo F.; Putz A.M. (2013) **Parabolic reactivity “coloring” molecular topology: Application to carcinogenic PAHs.** *Curr. Org. Chem.* 17(23):2816-2830 (DOI: 10.2174/13852728113179990128).
- **Putz M.V.;** Ori O.; De Corato M.; Putz A.M.; Benedek G.; Cataldo F.; Graovac A. (2013) Introducing „colored“ molecular topology by reactivity indices of electronegativity and chemical hardness. In: Ashrafi A.R.; Cataldo F.; Iranmanesh A.; Ori O. (Eds.) *TOPOLOGICAL MODELING OF NANOSTRUCTURES AND EXTENDED SYSTEMS*, Springer Verlag, Dordrecht, Chapter 9, pp. 265-286 (DOI: 10.1007/978-94-007-6413-2_9).
- **Putz M.V.** (2012) CHEMICAL ORTHOGONAL SPACES, Mathematical Chemistry Monographs Vol. 14, University of Kragujevac.
- **Putz M.V.,** Ed. (2012) QSAR & SPECTRAL-SAR IN COMPUTATIONAL ECOTOXICOLOGY, Apple Academics, Toronto.
- **Putz M.V.,** Putz A.M. (2010) "Timisoara Spectral – Structure Activity Relationship (Spectral-SAR) Algorithm: From Statistical and Algebraic Fundamentals to Quantum Consequences", in "QUANTUM FRONTIERS OF ATOMS AND MOLECULES", Mihai V. Putz (Ed.), *Series „Chemistry Research And Applications”*, NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA, ISBN: 978-1-61668-158-6, Chapter 21, https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=12687
- **Putz M.V.,** Lacrămă A.M. (2007) Introducing Spectral Structure Activity Relationship (S-SAR) Analysis. Application to Ecotoxicology, *Int. J. Mol. Sci.* 8:363-391. <http://www.mdpi.org/ijms/papers/i8050363.pdf>.
- Patel A (2001), Quantum Algorithms and the Genetic Code, IISc-CTS-2/00, arXiv: quant-ph/0002037, 2001, pp. 1-11.
- Maitland G.C., Rigby M., Smith E.B., Wakeham W.A. (1987) INTERMOLECULAR FORCES-THEIR ORIGIN AND DETERMINATION, Clarendon Press, Oxford.

8. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

- Înțelegerea corespunzătoare principiilor cuantice care stau la baza explicării interacțiilor specifice ligand-receptor.
- Capacitatea de a furniza și analiza modele/ecuații ale interacției chimico-biologice în farmacologie folosind și interpretând algoritmul QSAR (quantitative structure-activity relationship)
- Abilități de comunicare orală și scrisă
- Abilități de interpretare a rezultatelor obținute și de corelare cu datele de literatură.
- Capacitatea de adaptare la situații noi.
- Capacitatea de a utiliza metodele specifice de investigare.
- Capacitatea de a transpune în practică cunoștințele dobândite
- Abilități de dezvoltare a unui studiu/comentariu/caracterizare la nivel interdisciplinar
- Capacitatea de evaluare și autoevaluare critică
- Preocuparea pentru obținerea calității și autoperfecționare
- Respectarea proprietății intelectuale.

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare	9.2 Metode de evaluare	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Eseu (scris) și răspuns (oral) la examen	Evaluare scrisă și orală	25%
	Activitate și testare pe parcursul semestrului	Evaluare scrisă și orală	25%
9.5 Seminar / laborator	Activitate și testare pe parcursul semestrului	Evaluare scrisă și orală	25%
	Realizare eseuri pe baza materialelor bibliografice oferite de profesor sau căutate la indicațiile sale în bazele de date științifice internaționale	Evaluare scrisă	25%
9.6 Standard minim de performanță: Obținerea notei 5 la fiecare din activitățile anterior menționate.			

Data completării
27.02.2023

Titular de disciplină
Prof. univ. dr. dr.-hab. Mihai V. Putz

Data avizării în departament
27.02.2023

Director de departament
Lect.univ.dr. Adrian Sinitean