

FIȘA DISCIPLINEI
1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea de Vest din Timișoara
1.2 Facultatea / Departamentul	FACULTATEA DE CHIMIE, BIOLOGIE, GEOGRAFIE
1.3 Departamentul	DEPARTAMENTUL DE BIOLOGIE - CHIMIE
1.4 Domeniul de studii	CHIMIE
1.5 Ciclul de studii	MASTER
1.6 Programul de studii / Calificarea	CHIMIE CLINICĂ ȘI DE LABORATOR SANITAR

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	CHEMOINFORMATICA DE LABORATOR						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. Dr. Adriana ISVORAN						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. Dr. Adriana ISVORAN						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	II	2.6 Tipul de evaluare	Ex	2.7 Regimul disciplinei	DC/DO

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	din care: 3.2 curs	1	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	din care: 3.5 curs	14	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate / pe teren					20
Pregătire seminare / laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					25
Tutoriat					12
Examinări					6
Alte activități					
3.7 Total ore studiu individual	83				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	5				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> chimie organica, biochimie
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Pentru orele care se desfășoară online (50%), este necesar laptop/computer (nu telefon!), conexiune internet, aplicația de videoconferință Google Meet funcțională, participare activă la curs (camera pornită, reacții prompte la întrebările puse de profesor și participare la dezbateri). Pentru orele care se desfășoară face-to-face este necesar ca studenții să participe activ la curs, prin dezbateri.
5.2 de desfășurare a seminarului / laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Laborator de specialitate prevăzut cu computere conectate la internet și pe care sunt descărcate soft-uri de specialitate (Chimera). Studenții vor avea la dispoziție tutoriale pentru utilizarea diverselor programe informatice.

	<ul style="list-style-type: none"> • Pentru orele de laborator care se desfășoară online, este necesar ca fiecare student să aibă laptop/computer, conexiune internet, aplicația de videoconferință Google Meet funcțională, să participe activ la activități (camera pornită, reacții prompte la întrebările puse de profesor și participare la dezbateri, prezentarea datelor prelucrate);
--	---

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

Cunoștințe	<ul style="list-style-type: none"> • să explice și să interpreteze concepte, teorii, modele și noțiuni avansate de chimie; • să stabilească metodele adecvate de analiză în situații concrete. • să identifice alternative optime de analiză în vederea obținerii de informații relevante în domeniu; • să evalueze critic opțiunile privind etapele procesului de investigare; • să identifice și să precizeze informații științifice și cadrul reglementărilor legislative specifice domeniului. • să redacteze și să prezinte un raport științific (buletin de analiză)/profesional cu respectarea legislației în domeniu și să trimită la normativele în vigoare. • să cunoască cerințele de management al calității în laboratorul clinic; • să realizeze un studiu de caz specific domeniului clinic și sanitar.
Abilități	<ul style="list-style-type: none"> • să aplice integral aparatul conceptual și metodologic pentru rezolvarea problemelor complexe în condiții de informare incompletă; • să analizeze critic un articol/raport de specialitate cu grad de dificultate ridicat; • să elaboreze proiecte de cercetare inovativă utilizând metode chimice avansate. • să realizeze rapoarte profesionale/de cercetare specifice domeniului chimie clinică; • să finalizeze investigații specifice prin elaborarea de rapoarte sau concluzii conform reglementărilor în vigoare din domeniul clinic și sanitar. • să aibă capacitatea de a furniza rezultate cu un grad ridicat de încredere în urma analizelor chimico-sanitare;
Responsabilitate și autonomie	<ul style="list-style-type: none"> • să gestioneze proiecte de cercetare inovativă în domeniul chimico-sanitar; • să își asume responsabilitatea în cadrul proiectelor de cercetare; • să gestioneze activități de cercetare în cadrul laboratorului clinic și sanitar; • să gestioneze și să transforme situații de muncă complexe în noi abordări strategice;

7. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Recapitulare. 2h	Expunerea, conversația, problematizarea, demonstrația, modelarea.	Pentru orele care se vor desfășura față în față, vor fi expuneri urmate de dezbateri, studenții vor avea acces la suportul de curs în format electronic pe platforma Google Classroom și li se va
Relația structură chimică-activitate biologică/toxicologică pentru diverși compuși chimici utilizați în laboratorul chimic și sanitar. 4 h		
Baze de date pentru obținerea informațiilor asupra structurii și efectelor biologice/toxicologice ale		

diversilor compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar. 2 h		indica bibliografie. Pentru orele care se vor desfasura online, se va utiliza platforma Google Classroom, respectiv aplicația de videoconferință Google Meet.
Predictia tintelor moleculare ale diversilor compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar. 2h		
Vizualizarea si analiza structurii macromoleculor biologice si a interactiunilor pe care acestea le dezvoltă cu diversi compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar. 2h		
Modelarea moleculara a interactiunilor care conduc la manifestarea activitatii biologice a diversi compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar. 2h		
Bibliografie <ul style="list-style-type: none"> • Dastmalchi S., Hamzeh-Mivehroud M, Sokouty B., Methods and algorithms for molecular docking based drug design and discovery, IGI Global, 2019 • B. K. Herbert, K. G. Wang, T. L. J. Wang, Bioinformatics- database systems, CRC Press, 2017 • A Isvoran, Ghid practic de bioinformatica proteinelor, Ed. Universitatii de Vest Timisoara, 2012 • Claverie JM., Notredame C., Bioinformatics for dummies, Willey Publishing, 2nd edition, 2007 • Sidorof M, Butu A., Butu M., Bioinformatica, Ed. Tehnică, 2008 		
8.2 Laborator	Metode de predare	Observații
Introducere – prezentarea unui studiu bioinformatic 2h	invatare prin descoperire dirijata, problematizare, modelare.	Fiecare student lucrează individual, are propriul proiect. Pentru orele care se vor desfășura online, se va utiliza platforma Google Classroom, respectiv aplicația de videoconferință Google Meet.
Siguranta utilizarii diversilor compusi chimici in laboratorul cimic si sanitar – reglementari care includ studii comutationale. 2h		
Utilizarea bazele de date pentru compusi chimici cu actiune biologică (Foodb, PubChem, etc) si pentru macromolecule biologice 4h		
Predictia efectelor biologice si toxicologice (ADMET) ale diversilor compusi chimici utilizati in laboratoarul chimic si sanitar 6h.		
Vizualizarea si analiza structurii si a interactiunilor diversilor compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar cu tintele biologice. 6h		
Modelare computationala a activitatii biologice a diversilor compusi chimici utilizati in laboratoarul chimic si sanitar. 4 h		
Prezentare proiecte de laborator. 4h		
Bibliografie : <ul style="list-style-type: none"> • B. K. Herbert, K. G. Wang, T. L. J. Wang, Bioinformatics- database systems, CRC Press, 2017 • A Isvoran, Ghid practic de bioinformatica proteinelor, Ed. Universitatii de Vest Timisoara, 2012 • http://foodb.ca/ • wwPDB consortium, Protein Data Bank: the single global archive for 3D macromolecular structure data, Nucleic Acids Research 47: D520–D528, 2019 • The UniProt Consortium, UniProt: a worldwide hub of protein knowledge, Nucleic Acids Res. 47: D506-515 2019 		

- Kim S, Chen J, Cheng T, Gindulyte A, He J, He S, Li Q, Shoemaker BA, Thiessen PA, Yu B, Zaslavsky L, Zhang J, Bolton EE. PubChem 2019 update: improved access to chemical data. Nucleic Acids Res. 47(D1):D1102-1109, 2019
- Pettersen EF, Goddard TD, Huang CC, Couch GS, Greenblatt DM, Meng EC, Ferrin TE, UCSF Chimera--a visualization system for exploratory research and analysis.. J Comput Chem.;25(13):1605-12. 2004

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

În cadrul cursului se prezintă informațiile care trebuie să fie cunoscute pentru a modela efectele biologice ale diversilor compuși chimici utilizați în laboratorul chimic și sanitar, iar în cadrul laboratoarelor se formează deprinderi de utilizare a bazelor de date cu informații despre compușii chimici și a diferitelor metode de modelare moleculară a interacțiunilor xenobioticelor cu organismele vii.

9. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Stăpânirea minimă a conținutului științific din curs și bibliografia indicată.	Probă scrisă	50%
10.5 Seminar / laborator	Prezența obligatorie la toate ședințele de laborator și susținerea referatului de laborator la finalul semestrului.	Probă orală: susținere proiecte individuale.	50%
10.6 Standard minim de performanță			
<p>Promovarea probelor practice și scrise cu minim nota 5, conform baremelor de notare anunțate înaintea examinării.</p> <p>Complementar, în situația în care se consideră necesar, cadrul didactic poate suplimenta examinarea prin itemi administrați oral sau scris, după caz.</p> <p>Conform regulamentelor în vigoare, aceleași criterii se aplică și în sesiunile de restanță și mărituri.</p> <p>Orele de tutoriat se bazează pe consultări săptămânale cu orar fixat, comunicarea rapidă prin email sau alte variante de comunicare agreeate împreună cu studenții.</p>			

Data completării
23.02.2023

Titular de disciplină,
Prof. Dr. Habil. Adriana Isvoran

Data avizării în departament
24.02.2023

Director Departament,
Lector. Dr. Adrian Sinitean