

FIŞA 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 medicală						
1.5 Ciclul de studii	Licență						
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimie medicală						
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					16
Pregătire seminarii / laboratoare, teme, referate, portofolio și eseuri					14
Tutoriat					9
Examinări					10
Alte activități (traduceri, conspecete, conferinte studentesti, prezenta la evenimente stiintifice UVT, vizite ghidate la institute/laboratoare de cercetare in chimie-fizica structurala, voluntariat in popularizarea stiintei, etc.)					16
3.7 Total ore studiu individual	77				
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 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/On-line- pe Google Meet (in functie de statusul Stare de Alerta/COVID-19 în timp real)
5.2 de desfășurare a seminarului/laboratorului (față-în-față)	<ul style="list-style-type: none"> • Sală de seminar, retea de computere, acces internet (in functie de statusul Stare de Alerta/COVID-19 în timp real)
5.3 de desfășurare a activităților on-line	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții să aibă camera web pornită și să se afle într-un spațiu adekvat studiului pe toată durata activității didactice • Accesarea activităților didactice se va face prin utilizarea unui dispozitiv electronic care să permită participarea activă a studentului în plen și pe grupe, precum și realizarea în timp real a sarcinilor de lucru

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 compușii chimici, biochimici și farmaceutici. • C2 Explicarea și interpretarea unor noțiuni fundamentale, concepte, teorii, modele și proprietăți.
Abilități	<ul style="list-style-type: none"> • A2 Reflectia 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 curenti, 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	<ul style="list-style-type: none"> • Prezentări orale • Prelegere participativă • Dezbaterea • Demonstrația logică, 	<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 –

protonice.		
Interacții specifice modelate QSAR I. Filosofia QSAR. Formularea problemei. Soluția standard. Cazul acetilcolinesterazei.	matematică, fizică, și computatională Exemplificarea	ca răspuns la o situație enunțată, după principiul „cantitatea generează calitatea”.
Interacții specifice modelate QSAR II. Formalismul probabilistic.		<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
Interacții specifice modelate QSAR III. Fragmentare și defragmentare moleculară.		<ul style="list-style-type: none"> <i>Carduri de aplicații:</i> După ce studenții au fost introdusi 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.
Interacții specifice modelate QSAR IV. Statistica activității biologice.		<ul style="list-style-type: none"> <i>Ciorchinele:</i> metodă de brainstorming neliniară care stimulează găsirea conexiunilor dintre idei.
Interacții specifice modelate QSAR V. Ecuația QSAR și principiul cuantic al superpoziției.		<ul style="list-style-type: none"> <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.
Interacții specifice modelate QSAR VI. Principiile eco-toxicologice ale aplicării ecuației QSAR.		<ul style="list-style-type: none"> <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 acionează ca un ghid și se abține să ofere un răspuns gata fabricat.
Interacții specifice la nivel ecotoxicologic. Principiul lui Fisher. Holism și reducționism 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>Pictionary:</i> Profesorul notează pe biletete concepte importante, un student va extrage un biletel și va trebui să prezinte grafic conceptul, restul grupei având sarcina de a recunoaște despre ce este vorba.
Bibliografie		
<ul style="list-style-type: none"> Putz M.V. (2016) QUANTUM NANO CHEMISTRY. 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		
Principiile EU-QSAR I. Principiul definirii end-pointului. Semnificația EC50, NOEL, narcoza polară, etc.	<ul style="list-style-type: none"> • Prezentari orale • Experimente de calculator individuale • Rezolvări de probleme • Eseuri creative, formative 	<p>Se combină metodele creative de seminarizare interactivă:</p> <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 biletel 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 persoabe competente și/sau reprezentative care formează panelul. Aceste persoane analizează și dezbat o problemă, în timp ce profesorul intervene prin mesaje scrise. • <i>Eseul de 5 minute</i> (la inceput și finalul orei). La finalul orei scrie un lucru pe care l-au învățat din cursul respectiv și să formulize o întrebare pe care o mai au în legătură cu acesta (acestea vor fi ulterior dezbatute, 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 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</i>, 3-Volume Set: Volume 1: Structural Nanochemistry. Volume 2: Topological Nanochemistry. Volume 3: Sustainable Nanochemistry. 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-nanochemistryvolume-2-topological- 	

[nanochemistrybvvolume-3-sustainable-nanochemistry/9781771887809](#)

- **Putz M.V.**(2013) Spectral-diagonal approach of structure-property (activity) relationships: SD-QSP(A)R. The general formalism, *Int. J. Chem. Model.* 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 angajatorii reprezentativi din domeniul aferent programului

- Intelegerea corespunzătoare principiilor cuantice care stau la baza explicării interacțiilor specifice ligand-receptor.
- Capacitatea de a furniza și analiza modele/ecuații ale interacției chimico-bilogice în farmacologie folosind și interpretând algoritmul QSAR (quantitative structure-activity relationship)
- Abilitati de comunicare orala si scrisa
- Abilitati de interpretare a rezultatelor obținute și de corelare cu datele de literatură.
- Capacitatea de adaptare la situații noi.
- Capacitatea de a utilizare a metodelor specifice de investigare.
- Capacitatea de a transpune în practica cunoștințele dobândite
- Abilități de dezvoltare a unui studiu/comentariu/caracterizare la nivel interdisciplinar
- Capacitatea de evaluare și autoevaluare critică
- Preocuparea pentru obținerea calității și autoperfectionare
- Respectarea proprietății intelectuale.

9. Evaluare (poate fi actualizată din partea cadrului didactic în relație și acord cu studenții, pe parcurs)

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:Obtinerea notei 5 la fiecare din activitatile anterior menționate.			

Data completării
22.01.2024

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

Data avizării în departament
23.01.2024

Director de departament
Lect.univ.dr. Adrian Sînîtean