

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea de Vest din Timișoara
1.2 Facultatea / Departamentul	Chimie, Biologie, Geografie / Chimie
1.3 Catedra	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	CBGBCC62

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Chimie medicală computațională și structurală						
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	E	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, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					9
Examinări					10
Alte activități (traduceri, conspecte, conferințe studentesti, prezenta la evenimente științifice UVT, vizite ghidate la institute/laboratoare de cercetare în chimie-fizica structurală, voluntariat în popularizarea științei, 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	Chimie Cuantică, Structura și proprietățile moleculelor, Matematică, Fizică
4.2 de competențe	Cunoștințe de limba Engleză și de informatică

Adresă poștală: Bd. Vasile Pârvan nr. 4, cod poștal 300223, Timișoara, jud. Timiș, România

 Număr de telefon: +40-(0)256-592.300 (310); Adresă de e-mail: secretariat@e-uvt.ro; Website: www.uvt.ro

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Sală curs
5.2 de desfășurare a seminarului/laboratorului (fata-in-fata)	Sală de seminar, rețea de calculatoare, acces internet
5.3 de desfășurare a activităților on-line CLASSROOM: - Codul meet: https://meet.google.com/ujs-cpdh-eiz - Codul pentru curs: sqm6l5l	- Studentii să aibă camera web pornită și să se afle într-un spațiu adecvat 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	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	A2 Reflecția critică și constructivă pentru rezolvarea de probleme și situații în activitatea de analiză-cercetare și la locul de muncă;
Responsabilitate și autonomie	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	Metode de evaluare în actul învățării
Elemente de proiectarea moleculară a medicamentului. Ipoteza farmacoforă și 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 biologică specifică efector-receptor. Teoreme esențiale în teoria grafurilor. Modelarea reactivității chimice prin metrica spațială. Matrici topologice în chimia cuantică: matricile Hückel, de adiacență, de incidență, de distanță. Parametrii cuanto-chimici din matricea topologică: eigen-vectori, densități de sarcină, ordinul de legătură. Indici topologici: Wiener, Szeged, Harary, Pally, și Balaban Modele QSAR în funcție de modul de acțiune (MOA). Metoda Spectral-SAR I. S-SAR în contextul QSAR. Limitele QSAR; II. Algoritmul S-SAR; III. Factorul de corelare algebric. Harta Spectrala QSAR; IV. Metoda logistică-spectrală-SAR; Aplicații Spectral-SAR în Eco-toxico-farmaco-logie. Algoritm și semnificație.	- Prezentări orale - Prelegere participativă - Dezbaterea - Demonstrația logică, matematică, fizică, și computațională - Exemplificarea	Se combină metodele creative de învățare interactivă: Brainstorming sau asaltul de idei: formularea a cât mai multor idei – oricât de fanteziste ar putea părea acestea – ca răspuns la o situație enunțată, după principiul „cantitatea generează calitatea”. Bulgărele de zăpadă: reducerea numărului de elemente, aspecte, fațete ale unei probleme pentru focalizarea asupra celor esențiale Carduri de aplicații: 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. Ciorchinele: metodă de brainstorming neliniară care stimulează găsirea conexiunilor dintre idei. Diagrama de pește (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. PBL - Problem Based Learning: 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. Pictionary: Profesorul notează pe bilețele concepte importante, un student va extrage un bilețel și va trebui să reprezinte grafic conceptul, restul grupei având sarcina de a recunoaște despre ce este vorba.
Bibliografie (poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs, inclusiv pe adresa de Classroom) Putz M.V. (2020) (Editor) <i>New Frontiers in Nanochemistry: Concepts, Theories, and Trends</i>, 3-		

Adresă poștală: Bd. Vasile Pârvan nr. 4, cod poștal 300223, Timișoara, jud. Timiș, România

Număr de telefon: +40-(0)256-592.300 (310); Adresă de e-mail: secretariat@e-uvt.ro; Website: www.uvt.ro

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-nanochemistrybrvolume-2-topological-nanochemistrybrvolume-3-sustainable-nanochemistry/9781771887809>

- **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>
- Brady S.T., Siegel G.J., Wayne Albers R., Price D.L. (2012) BASIC NEUROCHEMISTRY. Principles of Molecular, Cellular, and Medical Neurobiology (8th Edition). 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	Metode de evaluare în actul învățării
Modul de acțiune al medicamentelor. Conceptul de bioizosterism: caracterizarea extensivă și cuantic intensivă. Agoniști și antagoniști. Rolul electronegativității în reglarea afinității specifice. Legea lui Grimm.	• Prezentari orale • Teme individuale • Rezolvări de probleme • Eseuri creative, formative	Se combină metodele creative de seminarizare și învățare interactivă: • <i>Discuția de tip panel</i> (sau echivalent): utilizarea unui grup mic (de ex. șase) de persoane competente și/sau reprezentative care formează panelul. Aceste persoane analizează și dezbate o problemă, în timp ce profesorul intervine prin mesaje scrise. • <i>Întrebarea deșteaptă</i>. Studenții scriu un concept/proces/subiect pe care l-au învățat din cursul/seminarul curent sau sumativ și formulează o întrebare pe care o mai au în legătura cu acesta; se va încerca un răspuns relevant la momentul respectiv, respectiv acestea vor fi ulterior dezbătute-urmărite-răspunse-studiate-apreciate, respectiv folosite la selecția studenților pentru cercetare științifică, cooptare în proiecte științifice, etc. • <i>Definiții inovative</i>: Se scriu cuvinte cheie din lecțiile anterioare, iar acestea se pun într-un bol.
Modelarea computațională a ecosistemelor biomoleculare. De la harta Ramachandran la analiza 3D-QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) a activității biologice.		
Interacții specifice la nivel enzimatic I. Modelarea cuantică a penetrării protonice intermoleculare.		
Interacții specifice la nivel enzimatic II. De la soluția W-Lambert a cineticii Michaelis-Menten la Absorbția spectrală Lambert-Beer.		
Interacții specifice la nivel enzimatic III. Determinarea timpilor efectivi ai reacțiilor enzimatic complexe. Cazurile în		

Adresă poștală: Bd. Vasile Pârvan nr. 4, cod poștal 300223, Timișoara, jud. Timiș, România

Număr de telefon: +40-(0)256-592.300 (310); Adresă de e-mail: secretariat@e-uvt.ro; Website: www.uvt.ro

vivo și in vitro.		Acestea se re-extrag aleatoriu la toată clasa iar studenții vor trebui să le explice /definească ad-hoc, în scris.
Interacții specifice la nivel enzimatic IV. Determinarea parametrilor cinetici prin fitare spectrală cu curbele de progresie logistică.		
Bibliografie (poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs, inclusiv pe adresa de Classroom) • 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. (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. (2011) On reducible character of Haldane-Radić enzyme kinetics to conventional and logistic Michaelis-Menten models. <i>Molecules</i> 16(4):3128-3145 (DOI:10.3390/molecules16043128). • Putz M.V., Putz A.M. (2011) Logistic vs. W-Lambert information in quantum modeling of enzyme kinetics. <i>Int. J. Chemoinform. Chem. Eng.</i> 1(1):42-60 (DOI: 10.4018/ijcce.2011010104). • 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.), <i>Series „Chemistry Research And Applications”</i>, 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.; Putz A.M.; Chiriac A.; Vlad-Oros B. (2008) ELEMENTE DE CINETICĂ CHIMICĂ OMOGENĂ, ENZIMATICĂ CLASICĂ ȘI LOGISTICĂ, Mirton Publishing House, Timișoara. • Putz M.V.; Lacrămă A.-M. (2007) Enzymatic control of the bio-inspired nanomaterials at the spectroscopic level. <i>J. Optoelectron. Adv. Mater.</i> 9(8):2529-2534. • Putz M.V.; Lacrămă A.-M.; Ostafe V. (2007) Introducing logistic enzyme kinetics. <i>J. Optoelectron. Adv. Mater.</i> 9(9):2910-2916. • Putz M.V.; Lacrămă A.-M.; Ostafe V. (2006) Full analytic progress curves of the enzymic reactions in vitro. <i>Int. J. Mol. Sci.</i> 7(11):469-484 (DOI: 10.3390/i7110469). • Putz M.V., Lacrămă A.-M., Ostafe V. (2006) Full time course analysis for reversible enzyme kinetics. <i>Proceedings of the VIII-th International Symposium "Young People and Multidisciplinary Research" (11-12 Mai 2006 Timișoara, Romania)</i>, Welding Publishing House, Association of Multidisciplinary Research of the West Zone of Romania, Timișoara (ISBN-10 973-8359-39-2, ISBN-13 978-8359-39-0), pp. 642-649. • Putz M.V., Lacrămă A.M. (2007) Introducing Spectral Structure Activity Relationship (S-SAR) Analysis. Application to Ecotoxicology, <i>Int. J. Mol. Sci.</i> 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 (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	Coroborarea conținutului științific al cursului cu o temă științifică de actualitate, evaluare periodică și finală	Centrate pe student, din cele alese în actul învățării (Secțiunile 7.1 și 7.2)	25%
9.5 Seminar / laborator	Evaluarea periodică, teste, teme și realizare eseu științific, autoevaluare		25%
9.6 Examen	Teste (eventual Grila) cu întrebări și probleme din temele predate, discutate și studiate, autoevaluare etică	Evaluare sintetică/scris	50%
9.7 Standard minim de performanță: Obținerea notei minime 5 (cinci) la punctele 9.4-9.6			

Data completării
03.02.2025

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

Data avizării în departament
05.02.2025

Director de departament
Conf.univ.dr. Vlad CHIRIAC