

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	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	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 structurala, 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	<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
5.2 de desfășurare a seminarului/laboratorului (față-în-față)	<ul style="list-style-type: none"> Sală de seminar, rețea de calculatoare, acces internet
5.3 de desfășurare a activităților on-line CLASSROOM: <ul style="list-style-type: none"> Codul meet: https://meet.google.com/ujs-cpdh-eiz Codul pentru curs: sqm6151 	<ul style="list-style-type: none"> 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	<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	Metode de evaluare în actul învățării
PRINCIPIUL INTERACȚIEI SPECIFICE LIGAND-RECEPTOR	<ul style="list-style-type: none"> Prezentări orale Prelegere participativă 	Se combină metodele creative de învățare interactivă: <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
PRINCIPIUL EFECTELOR SECUNDARE: PRINCIPIUL excipienților activatori PRINCIPIUL EVOLUȚIEI	<ul style="list-style-type: none"> Dezbaterea Demonstrația logică, matematică, fizică, și computațională 	

FORȚATE	<ul style="list-style-type: none"> Exemplificarea 	calitatea“.	
PRINCIPIUL DOZĂRII CUANTICE		<ul style="list-style-type: none"> <i>Bulgărele de zăpadă</i>: reducerea numărului de elemente, aspecte, fațete ale unei problem pentru focalizarea asupra celor esențiale 	
PRINCIPIUL TUNELĂRII CUANTICE		<ul style="list-style-type: none"> <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. 	
PRINCIPIUL ABSORBTIVITĂȚII MEDICAMENTOASE: cinetica substanței active		<ul style="list-style-type: none"> <i>Ciorchinele</i>: metodă de brainstorming neliniară care stimulează găsirea conexiunilor dintre idei. 	
PRINCIPIUL (QSAR al) PUNCTULUI FINAL (ENDPOINT)		<ul style="list-style-type: none"> <i>Diagrama 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. 	
PRINCIPIUL (QSAR al) ALGORITMULUI NEAMBIGUU: Algoritmul SPECTRAL-SAR		<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 acționează ca un ghid și se abține să ofere un răspuns gata fabricat. 	
PRINCIPIUL (QSAR al) DOMENIULUI DE APLICABILITATE		<ul style="list-style-type: none"> <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. 	
PRINCIPIUL (QSAR al) VALIDĂRII BIOACTIVITĂȚII			
PRINCIPIUL (QSAR al) INTERPRETĂRII MECANISTICE (CAUZĂ-EFECT) A BIOACTIVITĂȚII			
<p>Bibliografie (poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs, inclusiv pe adresa de Classroom)</p> <ul style="list-style-type: none"> 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	Metode de evaluare în actul învățării
SITUSURI SPECIFICE VS. NON-SPECIFICE	<ul style="list-style-type: none"> Prezentari orale Teme individuale Rezolvări de probleme Eseuri creative, formative 	Se combină metodele creative de seminarizare și învățare interactivă: <ul style="list-style-type: none"> <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. Acestea se re-extrag aleatoriu la toată clasa iar studenții vor trebui să le expliceze /definească ad-hoc, in scris.
INTRO FARMACOLOGIE, SAU OBSERVAREA BIOACTIVITĂȚII		
MEDICAMENTELE CA SUBSTANȚE IONIZABILE		
PARAMETRI CUANTO-CHIMICI ÎN PROIECTAREA MEDICAMENTULUI		
TAUTOMERIZAREA, PROTONAREA, TRANSFERUL DE SARCINA ÎN BIOACTIVAREA MEDICAMENTOASĂ		
DETECTAREA LEZIUNILOR ADN DATORATE MEDICAMENTELOR ANTITUMORALE ÎN BIOACTIVITATEA ANTI-CANCER		
RELAȚII STRUCTURĂ-ACTIVITATE PENTRU ENERGIA LIBERĂ/LINEAR FREE ENERGY RELATIONSHIPS (LFER)		
ANALIZA HANSCH A CORELAȚIILOR STRUCTURĂ CHIMICĂ ACTIVITATE BIOLOGICĂ		
MODELUL HAMMETT (AL SUBSTITUENȚILOR OMOLOGICI)		
CORELAREA STATISTICĂ PEARSON		
METODA MTD (MINIMAL TOPOLOGICAL DIFFERENCE), PRECURSOR 3D-QSAR		
Bibliografie (poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs, inclusiv pe adresa de Classroom) <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

- Intelegerea 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)
- Abilitati de comunicare orala si scrisa
- Abilitati de interpretare a rezultatelor obținute și de corelare cu datele de literatură.
- Capacitatea de adaptare la situatii noi.
- Capacitatea de a utilizare a metodelor specifice de investigare.
- Capacitatea de a transpune in practica cunostintele dobandite
- Abilități de dezvoltare a unui studiu/comentariu/caracterizare la nivel interdisciplinar
- Capacitatea de evaluare și autoevaluare critica
- Preocuparea pentru obținerea calității si autoperfectionare
- Respectareaproprietatiintelectuale.

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