

## 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                              |
| 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 | 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         |
| <b>Distribuția fondului de timp:</b>                                                                                                                                                                                                   |     |                    |    |                       | <b>ore</b> |
| 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 | <ul style="list-style-type: none"> <li>Chimie Cuantică, Structura și proprietățile moleculelor, Matematică, Fizică</li> </ul> |
| 4.2 de competențe | <ul style="list-style-type: none"> <li>Cunoștințe de limba Engleză și de informatică</li> </ul>                               |

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

|                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 5.1 de desfășurare a cursului                                                                                                                                                                                                                                        | <ul style="list-style-type: none"> <li>Sală curs/On-line- pe Google Meet</li> </ul>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 5.2 de desfășurare a seminarului/laboratorului (față-în-față)                                                                                                                                                                                                        | <ul style="list-style-type: none"> <li>Sală de seminar, rețea de computere, acces internet</li> </ul>                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| 5.3 de desfășurare a activităților on-line<br><b>CLASSROOM:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>Codul meet:<br/><a href="https://meet.google.com/ujs-cpdh-eiz">https://meet.google.com/ujs-cpdh-eiz</a></li> <li>Codul pentru curs: <b>sqm6l5l</b></li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii să aibă camera web pornită și să se afle într-un spațiu adecvat studiului pe toată durata activității didactice</li> <li>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</li> </ul> |

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

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

### 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"> <li>Prezentări orale</li> <li>Prelegere participativă</li> </ul>                              | Se combină metodele creative de învățare interactivă: <ul style="list-style-type: none"> <li><i>Brainstorming sau saltul de idei:</i> formularea a cât mai multor idei – oricât de fanteziste ar putea părea acestea – ca răspuns la o situație nenunțată, după principiul</li> </ul> |
| PRINCIPIUL EFECTELOR SECUNDARE: PRINCIPIUL excipienților activatori<br>PRINCIPIUL EVOLUȚIEI | <ul style="list-style-type: none"> <li>Dezbaterea</li> <li>Demonstrația logică, matematică, fizică, și computațională</li> </ul> |                                                                                                                                                                                                                                                                                       |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| FORȚATE                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | <ul style="list-style-type: none"> <li>Exemplificarea</li> </ul> | <p>„cantitateagenereazăcalitatea“.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><i>Bulgărele de zăpadă</i>: reducereanumărului de elemente, aspecte, fațete ale unei problem pentru focalizareaasupraceloresențiale</li> <li><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.</li> <li><i>Ciorchinele</i>: metodă de brainstorming neliniară care stimuleazăgăsireaconexiunilordintreidei.</li> <li><i>Diagramaosa de pește</i> (sau echivalent): problemacetrebuie rezolvatăăestenoatăîn n„capul” peștelui, apoi sunt înșiratecauzele, de-a lungul „oaselor” și împărțitepecategorii. Cauzelesuplimentare pot fi adăugatepenoiramificații.</li> <li><i>PBL - Problem Based Learning</i>: temaesteprezentată sub forma uneiprobleme de rezolvat de către studenți care au mijloaceleșiinformațilenecesare la dispoziție. Profesorulacționează ca un ghid și se abține să ofere un răspuns gata fabricat.</li> <li><i>Pictionary</i>: Profesorulnoteazăpebilețeleconcepteimp ortante, un student va extrage un bilețel și va trebui să reprezinte grafic conceptul, restul grupeia vînd sarcina de a recunoaște despre ce este vorba.</li> </ul> |
| PRINCIPIUL DOZĂRII CUANTICE                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| PRINCIPIUL TUNELĂRII CUANTICE                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| PRINCIPIUL ABSORBȚIVITĂȚII MEDICAMENTOASE: cinetica substanței active                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| PRINCIPIUL (QSAR al) PUNCTULUI FINAL (ENDPOINT)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| PRINCIPIUL (QSAR al) ALGORITMULUI NEAMBIGUU: Algoritmul SPECTRAL-SAR                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| PRINCIPIUL (QSAR al) DOMENIULUI DE APLICABILITATE                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| PRINCIPIUL (QSAR al) VALIDĂRII BIOACTIVITĂȚII                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| PRINCIPIUL (QSAR al) INTERPRETĂRII MECANISTICE (CAUZĂ-EFECT) A BIOACTIVITĂȚII                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| <p><b>Bibliografie (poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs, inclusiv pe adresa de Classroom)</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Putz M.V. (2016) QUANTUM NANOCHEMISTRY. A Fully Integrated Approach: Vol V. QUANTUM STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP (Qu-SAR) Apple Academic Press &amp; CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA, pp. 622+index; ISBN: 978-1-771881-37-1; URL: <a href="http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=9781771881371">http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=9781771881371</a></li> <li>Silverman R.B. (2004) THE ORGANIC CHEMISTRY OF DRUG DESIGN AND DRUG ACTION (2<sup>nd</sup> Edition). Elsevier- Academic Press, Amsterdam.</li> <li>Copeland R.A. (2000) ENZYMES-A PRACTICAL INTRODUCTION TO STRUCTURE, MECHANISM, AND DATA ANALYSIS (second edition), Wiley-VCH, New York.</li> <li>Chiriac A., Ciubotariu D., Simon Z. (eds.) (1996) RELAȚII CANTITATIVE STRUCTURĂ CHIMICĂ-ACTIVITATE BIOLOGICĂ (QSAR). Metoda MTD, Editura Mirton, Timișoara.</li> </ul> |                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |

| <ul style="list-style-type: none"> <li>Cantor C.R., Schimmel P.R. (1980) BIOPHYSICAL CHEMISTRY. III. THE BEHAVIOR OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES, W.H. Freeman and Co., San Francisco.</li> <li>Balaban A.T. (ed.) (1976) CHEMICAL APPLICATIONS OF GRAPH THEORY, Academic Press, London.</li> </ul>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 7.2 Seminar / laborator                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | Metode de predare                                                                                                                                               | Metode de evaluare în actul învățării                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| SITUSURI SPECIFICE VS. NON-SPECIFICE<br>INTRO FARMACOLOGIE, SAU OBSERVAREA BIOACTIVITĂȚII<br>MEDICAMENTELE CA SUBSTANȚE IONIZABILE<br>PARAMETRI CUANTO-CHIMICI ÎN PROIECTAREA MEDICAMENTULUI<br>TAUTOMERIZAREA, PROTONAREA, TRANSFERUL DE SARCINA ÎN BIOACTIVAREA MEDICAMENTOASĂ<br>DETECTAREA LEZIUNILOR ADN DATORATE MEDICAMENTELOR ANTITUMORALE ÎN BIOACTIVITATEA ANTI-CANCER<br>RELAȚII STRUCTURĂ-ACTIVITATE PENTRU ENERGIA LIBERĂ/LINEAR FREE ENERGY RELATIONSHIPS (LFER)<br>ANALIZA HANSCH A CORELAȚIILOR STRUCTURĂ CHIMICĂ ACTIVITATE BIOLOGICĂ<br>MODELUL HAMMETT (AL SUBSTITUENȚILOR OMOLOGICI)<br>CORELAREA STATISTICĂ PEARSON<br>METODA MTD (MINIMAL TOPOLOGICAL DIFFERENCE), PRECURSOR 3D-QSAR                                     | <ul style="list-style-type: none"> <li>Prezentari orale</li> <li>Teme individuale</li> <li>Rezolvări de probleme</li> <li>Eseuri creative, formative</li> </ul> | <p>Se combină metodele creative de seminarizare și învățare interactivă:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><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 dezbătu o problemă, în timp ce profesorul intervine prin mesaje scrise.</li> <li><i>Întrebare deșteaptă.</i> <i>Studentul scrie un concept/proces/subiect pe care l-au învățat din cursul/seminarului curent sau sumativ și formulează o întrebare pe care o mai au în legătură cu acesta; se va încerca un răspuns relevant la momentul respectiv, respectiv aceste vor fi ulterior dezbătute - urmăriți - răspunse - studiate - apreciate, respectiv folosite la selecția studenților pentru cercetare științifică, cooptare în proiecte științifice, etc.</i></li> <li><i>Definiții inovative:</i> Se scrie cuvintele 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 explice / definească ad-hoc, în scris.</li> </ul> |
| <b>Bibliografie (poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs, inclusiv pe adresa de Classroom)</b> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Putz M.V.</b> (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 &amp; CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA. pp. 1479+index; ISBN: 978-1-771887-80-9; URL: <a href="http://www.appleacademicpress.com/new-frontiers-in-nanochemistry-concepts-theories-and-">http://www.appleacademicpress.com/new-frontiers-in-nanochemistry-concepts-theories-and-</a></li> </ul> |                                                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |

[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, *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](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-bilogice în farmacologie folosind și interpretând algoritmul QSAR (quantitative structure-activity relationship)
- Abilitati de comunicare orală și scrisă
- Abilitati 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
- Respectare a proprietății intelectuale.

## 9. Utilizarea instrumentelor bazate pe inteligența artificială generativă

Pentru realizarea sarcinilor definite la secțiunea 10.1 **ESTE** permisă utilizarea instrumentelor pentru generarea de idei/slogan/design/imagini/rescriere de text, editare/review. Exemplele cele mai cunoscute de instrumente *genAI* includ, dar nu se rezumă la: ChatGPT, Google Gemini, Copilot pentru text sau MidJourney pentru imagini. Studentul va preciza instrumentul pe care l-a utilizat și partea din sarcină în care acesta a fost utilizat.

## 10. Evaluare

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

| Tip activitate                                                                             | 10.1 Criterii de evaluare                                                                                          | 10.2 Metode de evaluare                                                        | 10.3 Pondere din nota finală |
|--------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|------------------------------|
| 10.4 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%                          |
| 10.5 Seminar / laborator                                                                   | Evaluarea periodică, teste, teme și realizare eseu științific, autoevaluare                                        |                                                                                | 25%                          |
| 10.6 Examen                                                                                | Teste (eventual Grila) cu întrebări și probleme din temele predate, discutate și studiate, autoevaluare etică      | Evaluare sintetică/scris                                                       | 50%                          |
| 10.7 Standard minim de performanță: Obținerea notei minime 5 (cinci) la punctele 10.4-10.6 |                                                                                                                    |                                                                                |                              |

Data completării  
05.02.2026

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

Data avizării în departament  
05.02.2026

Director de departament  
Conf. univ. dr. Vlad Chiriac