

FIȘA DISCIPLINEI
1. Date despre program

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

2. Date despre disciplină

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

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	din care: 3.2 curs	1	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					30
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate / pe teren					30
Pregătire seminare / laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					25
Tutoriat					17
Examinări					8
Alte activități					
3.7 Total ore studiu individual	102				
3.8 Total ore pe semestru	150				
3.9 Numărul de credite	6				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• chimie organica, biochimie
4.2 de competențe	• nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Studentii sa participe activ la curs, prin dezbateri.
5.2 de desfășurare a seminarului / laboratorului	- Laborator de specialitate prevăzut cu computere conectate la internet si pe care sunt descarcate soft-uri de specialitate (Chimera). - Studentii vor avea la dispoziție tutoriale pentru utilizarea diverselor programe informatice.

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

Cunoștințe	● să explice și să interpreteze concepte, teorii, modele și noțiuni avansate de chimie; ● să stabilească metodele adecvate de analiza în situații concrete. ● să identifice alternative optime de analize în vederea obținerii de informații relevante în domeniu; ● să evalueze critic opțiunile privind etapele procesului de investigare; ● să identifice și să precizeze informații științifice și cadrul reglementărilor legislative specifice domeniului. ● să redacteze și să prezinte un raport științific (buletin de analize)/profesional cu respectarea legislației în domeniu și să trimită la normativele în vigoare. ● să cunoască cerințele de management al calității în laboratorul clinic; ● să realizeze un studiu de caz specific domeniului clinic și sanitar.
Abilități	● să aplice integral aparatul conceptual și metodologic pentru rezolvarea problemelor complexe în condiții de informare incompletă; ● să analizeze critic un articol/raport de specialitate cu grad de dificultate ridicat; ● să elaboreze proiecte de cercetare inovativă utilizând metode chimice avansate. ● să realizeze rapoarte profesionale/de cercetare specifice domeniului chimie clinică; ● să finalizeze investigații specifice prin elaborarea de rapoarte sau concluzii conform reglementărilor în vigoare din domeniul clinic și sanitar. ● să aibă capacitatea de a furniza rezultate cu un grad ridicat de încredere în urma analizelor chimico-sanitare;
Responsabilitate și autonomie	● să gestioneze proiecte de cercetare inovativă în domeniul chimico-sanitar; ● să își asume responsabilitatea în cadrul proiectelor de cercetare; ● să gestioneze activități de cercetare în cadrul laboratorului clinic și sanitar; ● să gestioneze și să transforme situații de muncă complexe în noi abordări strategice;

7. Conținuturi

Platforma prin care pot fi accesate suportul de curs în format electronic și alte resurse de învățare/bibliografice: Classroom

7.1 Curs	Metode de predare	Observații
Recapitulare. Cheminformatica versus bioinformatica – generalitati si repere istorice 2h	Expunerea, conversatia, problematizarea, demonstratia, modelarea.	Pentru orele care se vor desfasura fata in fata, vor fi expuneri urmate de dezbateri, studentii vor avea acces la suportul de curs in format electronic pe platforma Google Classroom si li se va indica bibliografie. Pentru orele care se vor desfasura online, se va utiliza platforma Google Classroom, respectiv
Modalitati de reprezentare a compusilor chimici utilizate in chemoinformatica 2h		
Proprietati de absorbtie, distributie, metabolism, excretie si toxicitate a compusilor chimici – 2h		
Relatia structura chimica-activitate biologica/toxicologica pentru diversi compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar. 2 h		
Baze de date pentru obținerea informațiilor asupra structurii si efectelor biologice/ toxicologice ale		

diversilor compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar. 2 h		aplicația de videoconferință Google Meet.
Vizualizarea si analiza structurii macromoleculelor biologice si a interactiunilor pe care acestea le dezvoltă cu diversi compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar. 2h		
Modelarea moleculara a interactiunilor care conduc la manifestarea activitatii biologice a diversi compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar. 2h		
Bibliografie • Dastmalchi S., Hamzeh-Mivehroud M, Sokouty B., Methods and algorithms for molecular docking based drug design and discovery, IGI Global, 2019 • B. K. Herbert, K. G. Wang, T. L. J. Wang, Bioinformatics- database systems, CRC Press, 2017 • A Isvoran, Ghid practic de bioinformatica proteinelor, Ed. Universitatii de Vest Timisoara, 2012 • Claverie JM., Notredame C., Bioinformatics for dummies, Willey Publishing, 2nd edition, 2007 • Sidorof M, Butu A., Butu M., Bioinformatica, Ed. Tehnică, 2008		
7.2 Laborator	Metode de predare	Observații
Introducere – prezentarea unui studiu chemoinformatic 2h	invatare prin descoperire dirijata, problematizare, modelare.	Fiecare student lucrează individual, are propriul proiect. Pentru orele care se vor desfășura online, se va utiliza platforma Google Classroom, respectiv aplicația de videoconferință Google Meet.
Utilizarea bazele de date pentru compusi chimici cu actiune biologică (Foodb, PubChem, etc) si pentru macromolecule biologice 4h		
Predictia profilelor de absorbtie, distributie, metabolism, excretie si toxicitate (ADMET) ale diversilor compusi chimici utilizati in laboratoarul chimic si sanitar 6h.		
Predictia tintelor moleculare ale compusilor chimici – 2 h		
Vizualizarea si analiza structurii si a interactiunilor diversilor compusi chimici utilizati in laboratorul chimic si sanitar cu tintele biologice. 6h		
Modelare computationala a activitatii biologice a diversilor compusi chimici utilizati in laboratoarul chimic si sanitar. 4 h		
Prezentare proiecte de laborator. 4h		
Bibliografie : • B. K. Herbert, K. G. Wang, T. L. J. Wang, Bioinformatics- database systems, CRC Press, 2017 • A Isvoran, Ghid practic de bioinformatica proteinelor, Ed. Universitatii de Vest Timisoara, 2012 • http://foodb.ca/ • wwPDB consortium, Protein Data Bank: the single global archive for 3D macromolecular structure data, Nucleic Acids Research 47: D520–D528, 2019 • The UniProt Consortium, UniProt: a worldwide hub of protein knowledge, Nucleic Acids Res. 47: D506-515 2019 • Kim S, Chen J, Cheng T, Gindulyte A, He J, He S, Li Q, Shoemaker BA, Thiessen PA, Yu B, Zaslavsky L, Zhang J, Bolton EE. PubChem 2019 update: improved access to chemical data. Nucleic Acids Res. 47(D1):D1102-1109, 2019		

- Pettersen EF, Goddard TD, Huang CC, Couch GS, Greenblatt DM, Meng EC, Ferrin TE, UCSF Chimera--a visualization system for exploratory research and analysis.. J Comput Chem.;25(13):1605-12. 2004

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

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

9. Utilizarea instrumentelor bazate pe inteligența artificială generativă

Pentru realizarea sarcinilor definite la secțiunea de evaluare nu este permisă utilizarea IIAgen.

10. Evaluare

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

Data completării
30.01.2026

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

Data avizării în departament
30.01.2026

Director Departament,
Conf. Dr. Vlad Chiriac