

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Politehnica Timișoara
1.2 Facultatea ¹ / Departamentul ²	Inginerie Chimică, Biotehnologii și Protecția Mediului / CAICON
1.3 Domeniul de studii (denumire/cod ³)	Inginerie Chimică / 10.30.50
1.4 Ciclul de studii	Licență
1.5 Programul de studii (denumire/cod/calificarea)	Chimia și Ingineria Substanțelor Organice, Petrochimie și Carbochimie / 10.30.50.20 / 214513 – inginer chimist; 214506 – inspector de specialitate inginer chimist

2. Date despre disciplină

2.1a Denumirea disciplinei/Categoria formativă ⁴	Reactivitate chimică și activitate biologică / DS						
2.1b Denumirea disciplinei în limba engleză	Chemical reactivity and biological activity						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf.dr.ing. Anamaria TODEA						
2.3 Titularul activităților aplicative ⁵	Conf.dr.ing. Anamaria TODEA						
2.4 Anul de studii ⁶	IV	2.5 Semestrul	8	2.6 Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei ⁷	DOP

3. Timp total estimat - ore pe semestru: activități didactice directe (asistate integral sau asistate parțial) și activități de pregătire individuală (neasistate) ⁸

3.1 Număr de ore asistate integral/săptămână	3.5 , format din:	3.2 ore curs	2	3.3 ore seminar/laborator/proiect	0/1.5 /0
3.1* Număr total de ore asistate integral/sem.	49 , format din:	3.2* ore curs	28	3.3* ore seminar/laborator/proiect	0/21/0
3.4 Număr de ore asistate parțial/săptămână	, format din:	3.5 ore practică		3.6 ore elaborare proiect de diplomă	
3.4* Număr total de ore asistate parțial/semestru	, format din:	3.5* ore practică		3.6* ore elaborare proiect de diplomă	
3.7 Număr de ore activități neasistate/săptămână	3.64 , format din:	ore documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren			1.64
		ore studiu individual după manual, suport de curs, bibliografie și notițe			1
		ore pregătire seminarii/laboratoare, elaborare teme de casă și referate, portofolii și eseuri			1
3.7* Număr total de ore activități neasistate/semestru	51 , format din:	ore documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren			23
		ore studiu individual după manual, suport de curs, bibliografie și notițe			14
		ore pregătire seminarii/laboratoare, elaborare teme de casă și referate, portofolii și eseuri			14
3.8 Total ore/săptămână ⁹	7.14				
3.8* Total ore/semestru	100				
3.9 Număr de credite	4				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	Chimie organică; Biochimie; Chimie fizică; metode spectroscopice; noțiuni de modelare moleculară și utilizarea calculatoarelor.
4.2 de rezultatele învățării	Cunoașterea structurii și reactivității compușilor organici; noțiuni privind structura biomoleculelor și interacțiunile intermoleculare; utilizarea de bază a aplicațiilor informatice.

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Sală de curs prevăzută cu tablă, sistem video, calculator și acces la internet; acces la baze de date și resurse electronice de specialitate.
5.2 de desfășurare a activităților practice	Sală de calculatoare cu acces la internet și programe pentru vizualizare moleculară, pregătirea liganzilor/proteinelor, docking molecular și analiza interacțiunilor proteină-ligand.

6. Rezultatele învățării la formarea cărora contribuie disciplina

Cunoștințe	- C2. Cunoștințe privind structura, proprietățile și reactivitatea compușilor organici și a biomoleculelor, precum și relația structură–activitate biologică. - C6. Cunoștințe privind metodele de analiză, modelare și caracterizare utilizate pentru studiul compușilor organici și al interacțiunilor acestora cu ținte biologice.
Abilități	- A2. Aplicarea conceptelor de chimie și biochimie pentru interpretarea reactivității și activității biologice. - A5.2. Utilizarea metodelor și instrumentelor informatice pentru vizualizarea și analiza structurilor moleculare. - A5.3. Interpretarea datelor obținute prin modelare moleculară și corelarea structurii cu proprietățile și activitatea biologică. - A5.4. Utilizarea unor metode computaționale de bază pentru investigarea interacțiunilor ligand–proteină și evaluarea rezultatelor de docking molecular.
Responsabilitate și autonomie	- RA1. Îndeplinirea responsabilă a sarcinilor individuale și de echipă. - RA2. Selectarea și utilizarea critică a surselor de informație și a instrumentelor digitale adecvate. - RA3. Interpretarea argumentată a rezultatelor și formularea de concluzii pe baza datelor obținute. - RA4. Dezvoltarea autonomiei în documentare, analiză și rezolvarea unor probleme de reactivitate chimică și activitate biologică.

7. Obiectivele disciplinei (asociate rezultatelor învățării de la punctul 6)

- Înțelegerea relației dintre structura moleculară, reactivitatea chimică și activitatea biologică, cu accent pe interacțiunile compușilor organici cu macromolecule biologice.
- Dezvoltarea capacității de utilizare a metodelor moderne de vizualizare moleculară și docking pentru analiza interacțiunilor ligand–proteină și interpretarea critică a rezultatelor computaționale.

8. Conținuturi¹⁰

8.1 Curs	Număr de ore	Metode de predare ¹¹
Introducere în relația structură–reactivitate–activitate biologică. Tipuri de interacțiuni moleculare relevante în sisteme biologice: legături de hidrogen, interacțiuni electrostatice, hidrofobe și van der Waals.	2	Expunere interactivă; prezentări multimedia; demonstrații pe calculator; utilizarea bazelor de date structurale și a programelor de vizualizare/modelare moleculară; studii de caz și resurse electronice.
Structura tridimensională a proteinelor. Niveluri de organizare structurală; situsuri active și situsuri de legare; reziduuri catalitice; flexibilitate conformațională și complementaritate moleculară.	4	
Baze de date structurale și identificarea țintelor biologice. Structuri experimentale și modele predictive; selecția structurii proteice și evaluarea calității modelului.	2	
Vizualizarea proteinelor și a complexelor proteină–ligand. Reprezentări moleculare, identificarea cavităților, măsurarea distanțelor și unghiurilor, analiza reziduurilor din situsul de legare.	4	
Pregătirea structurilor pentru studii computaționale. Pregătirea proteinei și ligandului, protonare, sarcini, conformeri, minimizare energetică și definirea spațiului de căutare.	4	
Principiile dockingului molecular. Algoritmi de căutare, funcții de scor, rigiditatea/flexibilitatea receptorului și ligandului, validarea protocolului prin redocking și RMSD.	4	
Analiza rezultatelor de docking. Poze de legare, energie/scor de	4	

legare, clustering, interacțiuni cu reziduurile aminoacidice; criterii geometrice și interpretarea plauzibilității biologice.		
Relații structură–activitate (SAR/QSAR) și descriptori moleculari. Corelarea proprietăților fizico-chimice și structurale cu activitatea biologică; limitele modelelor predictive.	2	
Studii de caz integrate: de la structura ligandului la interacțiunea cu ținta biologică. Interpretarea critică a rezultatelor, limitele dockingului și complementaritatea cu date experimentale.	2	
Bibliografie ¹² 1. Leach, A.R. Molecular Modelling: Principles and Applications, Pearson. 2. Kitchen, D.B. et al. Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: methods and applications. Nature Reviews Drug Discovery, 2004, 3, 935–949. 3. Trott, O.; Olson, A.J. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking. Journal of Computational Chemistry, 2010, 31, 455–461. 4. Pettersen, E.F. et al. UCSF Chimera—A visualization system for exploratory research and analysis. Journal of Computational Chemistry, 2004, 25, 1605–1612. 5. M. Medeleanu, Modelarea nanostructurilor, Ed. POLITEHNICA, Timișoara, 2013. 6. Paggi J.M., Pandit A., Dror R.O., The Art and Science of Molecular Docking, Annual Review of Biochemistry, 93, 389–410, 2024. 7. Ma Z., Ajibade A., Zou X., Docking Strategies for Predicting Protein-Ligand Interactions and Their Application to Structure-Based Drug Design, Communications in Information and Systems, 24(3), 199–230, 2024.		
8.2 Activități aplicative¹³	Număr de ore	Metode de predare
Introducere în vizualizarea moleculară. Accesarea și analiza unei structuri proteice; reprezentări 3D, lanțuri, liganzi, apă și reziduuri relevante.	3	Aplicații practice pe calculator; lucru individual și în echipă; exerciții ghidate; utilizarea programelor de vizualizare moleculară și docking; analiză și interpretare de rezultate
Identificarea și caracterizarea situsului de legare. Selectarea reziduurilor, măsurarea distanțelor și analiza interacțiunilor proteină-ligand.	3	
Pregătirea ligandului pentru docking: construcție 2D/3D, protonare, optimizare geometrică, conformeri și formate moleculare.	3	
Pregătirea proteinei pentru docking: curățarea structurii, hidrogeni, sarcini, selectarea receptorului și definirea gridului/spațiului de căutare	3	
Docking molecular ligand–proteină: configurarea parametrilor, rularea calculelor și selectarea pozelor de legare.	3	
Analiza și vizualizarea rezultatelor de docking: scoruri, clustering, legături de hidrogen, interacțiuni hidrofobe/electrostatice și reziduuri-cheie.	3	
Studiu de caz integrat: compararea mai multor liganzi pentru aceeași țintă biologică; corelarea structurii cu rezultatele dockingului și formularea concluziilor.	3	
Bibliografie ¹⁴ 1. Trott, O.; Olson, A.J. AutoDock Vina, Journal of Computational Chemistry, 2010. 2. Pettersen, E.F. et al. UCSF Chimera, Journal of Computational Chemistry, 2004. 3. Documentația programelor și bazelor de date utilizate în cadrul activităților practice; referate și materiale de laborator. 4. Todea A., Fortuna S., Vattovaz D., di Stefano D., Carosati E., Vlad M., Gardossi L., <i>Enzymes for Synthesis and Degradation of Bio-Based Polyesters: Automatic In Silico Screening and Experimental Validation</i> , ChemSusChem, 19(7), e202502311, 2026. DOI: 10.1002/cssc.202502311		

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare ¹⁵	9.2 Metode de evaluare	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Cunoașterea conceptelor privind relația structură–reactivitate–activitate biologică; înțelegerea structurii proteinelor, a interacțiunilor ligand–proteină și a principiilor	Test scris tip grilă și evaluare orală, cu întrebări teoretice și interpretarea unor rezultate/imagini de modelare moleculară și docking.	50%

	dockingului molecular; capacitatea de interpretare și corelare a rezultatelor.		
9.5 Activități aplicative	S:		50%
	L: Capacitatea de utilizare a programelor de vizualizare moleculară și docking; pregătirea corectă a structurilor; analiza interacțiunilor și interpretarea critică a rezultatelor; participarea la activitățile practice.	Evaluare continuă pe parcursul laboratorului prin sarcini practice, discuții, verificarea rezultatelor obținute și prezentarea unui studiu de caz de docking molecular.	50%
	P¹⁶:		
	Pr:		
9.6 Standard minim de performanță (se prezintă cunoștințele minim necesare pentru promovarea disciplinei și modul în care se verifică stăpânirea lor ¹⁷)			
• Descrierea adecvată a relației dintre structura moleculară, reactivitatea chimică și activitatea biologică. • Identificarea elementelor structurale principale ale unei proteine și a situsului de legare și recunoașterea tipurilor fundamentale de interacțiuni ligand–proteină. • Aplicarea etapelor de bază ale unui protocol de vizualizare și docking molecular și interpretarea elementară a rezultatelor obținute. • Pentru promovarea disciplinei trebuie obținută cel puțin nota 5 la evaluarea finală și cel puțin nota 5 la activitatea de laborator.			

Data completării

**Titular de curs
(semnătura)**

Conf.dr.ing. Anamaria TODEA

**Titular activități aplicative
(semnătura)**

Conf.dr.ing. Anamaria TODEA

**Director de departament
(semnătura)**

Ș.L.dr.ing. Andra TĂMAȘ

Data avizării în Consiliul Facultății¹⁸

**Decan
(semnătura)**

Conf.dr.ing. Mircea Laurențiu DAN