

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 BIOLOGIE - CHIMIE
1.4 Domeniul de studii	BIOLOGIE
1.5 Ciclul de studii	DOCTORAT
1.6 Programul de studii	Școala Doctorală de Biologie

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	METODE COMPUTAȚIONALE SI BAZE DE DATE UTILIZATE ÎN CERCETARE IN DOMENIUL BIOLOGIEI						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. dr. habil. Adriana ISVORAN						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. dr. habil. Adriana ISVORAN						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	I	2.6 Tipul de evaluare	C	2.7 Regimul disciplinei	DOP

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	36	din care: 3.5 curs	12	3.6 seminar/laborator	24
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					25
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate / pe teren					25
Pregătire seminare / laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					25
Tutoriat					14
Examinări					6
Alte activități					
3.7 Total ore studiu individual	94				
3.8 Total ore pe semestru	150				
3.9 Numărul de credite	6				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> chimie organica, biochimie, bioinformatica, bichimie structurala
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Conexiune internet.
5.2 de desfășurare a seminarului / laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții vor cunoaște diverse baze de date care sunt utile în cercetare în domeniul Biologie. • Studenții vor cunoaște programe computaționale care permit estimarea activității biologice/toxicologice a componentilor organici endogeni sau exogeni; • Studenții vor cunoaște programe computaționale care permit vizualizarea și analiza structurii macromoleculor biologice. • Studenții vor cunoaște modalități de modelare moleculară a interacțiunilor proteine/proteine și proteine/liganzi.
Abilități	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții vor extrage și utiliza informație din diverse baze de date care sunt utile în cercetare în domeniul Biologie. • Studenții vor utiliza unele programe computaționale care permit estimarea activității biologice/toxicologice a componentilor organici endogeni sau exogeni și vor interpreta rezultatele obținute; • Studenții vor utiliza unele programe computaționale care permit vizualizarea și analiza structurii macromoleculor biologice și vor interpreta rezultatele obținute. • Studenții vor utiliza modelarea moleculară ca modalitate de modelare moleculară a interacțiunilor proteine/proteine și proteine/liganzi și vor interpreta rezultatele obținute. • Studenții vor dobândi abilitatea de a aborda studii interdisciplinare.
Responsabilitate și autonomie	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții vor fi capabili să lucreze în echipă, să își asume roluri în cadrul colaborării cu colegii, să își asume responsabilitatea îndeplinirii sarcinilor individuale.

7. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Recapitulare notiuni fundamentale de structura materiei și organizarea diferitelor niveluri ale organismelor vii. 2h	Expunerea, conversația, problematizarea, demonstrația, modelarea.	Studenții vor avea acces la suportul de curs și li se va indica bibliografie.
Relația structură chimică-activitate biologică pentru compușii organici. 2 h		
Baze de date pentru obținerea informațiilor asupra structurii și efectelor biologice și toxicologice ale compușilor cu activitate biologică. 2 h		
Vizualizarea și analiza structurii macromoleculor biologice și a interacțiunilor pe care acestea le dezvoltă 2 h		
Modelarea moleculară a interacțiunilor care conduc la manifestarea activității biologice a diverse xenobiotice 2h		
Bibliografie <ul style="list-style-type: none"> • 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 bioinformatică proteinelor, Ed. Universității de Vest Timișoara, 2012 • Claverie JM., Notredame C., Bioinformatics for dummies, Willey Publishing, 2nd edition, 2007 • Sidorof M, Butu A., Butu M., Bioinformatică, Ed. Tehnică, 2008 		
8.2 Laborator	Metode de predare	Observații

Utilizarea bazele de date pentru compusi chimici cu actiune biologică (Foodb, PubChem, etc) si pentru macromolecule biologice 4h	invatare prin descoperire dirijata, problematizare, modelare.	
Evaluarea computationala a efectelor biologice ale unor compusi organici. 4h		
Predictia tintelor moleculare ale compusilor organici 2h		
Vizualizarea si analiza structurii tinte moleculare 6h.		
Modelare computationala a activitatii biologice a unor xenobiotice 6h		
Bibliografie : <ul style="list-style-type: none"> • 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

In cadrul cursului se prezinta informatiile care trebuie sa fie cunoscute pentru a evalua efectele biologice ale diverselor xenobiotce și a modela intercatiunile moleculare care stau la baza manifestării acestor efecte. În cadrul laboratoarelor se formeaza deprinderi de utilizare a bazelor de date cu informatii despre xenobiotice si diferitelor metode de evaluare a activității biologice/toxicologice a compusilor organici și de modelare moleculara a interactiunilor xenobioticelor cu organismele vii.

9. 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 orală.	50%
10.5 Seminar / laborator	Prezența obligatorie la toate ședințele de laborator și susținerea referatului de laborator la finalul semestrului.	Probă orală: susținere proiect.	50%
10.6 Standard minim de performanță			
Promovarea probelor cu minim nota 5. Conform regulamentelor în vigoare, aceleași criterii se aplică și în sesiunile de restanță și măriri. Orele de tutoriat se bazează pe consultatii saptamanale cu orar fixat, comunicarea rapidă prin email sau alte variante de comunicare agreate împreună cu studenții.			

Data completării
31.07.2023

Titular de disciplină,
Prof. dr. habil. Adriana Isvoran