

**FIȘA DISCIPLINEI****1. Date despre program**

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași
1.2 Facultatea	Facultatea de Chimie
1.3 Departamentul	DEPARTAMENTUL DE CHIMIE
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclu de studii	Masterat
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimie clinică

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei			Structura, dinamica și energetica sistemelor moleculare. Farmacocinetică și farmacodinamică				
2.2 Titularul activităților de curs			Conf. Dr. MIRCEA ODIN APOSTU/ Conf. Dr. IONEL HUMELNICU				
2.3 Titularul activităților de laborator			Conf. Dr. MIRCEA ODIN APOSTU/ Conf. Dr. IONEL HUMELNICU				
2.4 An de studiu	II	2.5 Semestrul	IV	2.6 Tip de evaluare*	E	2.7 Regimul disciplinei**	Op

*E – Examen / C – Colocviu / V – Verificare

**OB – Obligatoriu / OP – Opțional / F – Facultativ

3. Timpul total estimat (ore pe semestru și activități didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	48	3.5 curs	24	3.6 seminar/laborator	24
Distribuția fondului de timp					ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și altele					40
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					30
Pregătire seminare/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					15
Tutoriat					10
Examinări					7
Alte activități					0
3.7 Total ore studiu individual*					102
3.8 Total ore pe semestru					150
3.9 Numărul de credite					6

4. Precondiții - De curriculum (dacă este cazul)

Termodinamică chimică, Cinetică Chimică, Chimie cuantică și structură, Matematică

5. Condiții (dacă este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	Sală de curs dotată cu videoproiector și internet
5.2 De desfășurare a laboratorului	Sală de laborator dotată cu calculatoare și videoproiector

6. Obiective

Înșușirea elementelor de bază, familiarizarea și utilizarea de către studenți a noțiunilor, conceptelor și metodelor de lucru în studiul structurii, energeticii și dinamicii sistemelor metabolice.

La finalizarea cu succes a acestei discipline, studenții vor fi capabili să:

- Descrie și analizeze structura, proprietățile de reactivitate și spectrale ale sistemele chimice studiate
- Explice și aplice principalele metode de investigare ale modelării moleculare în explicarea structurii spațiale a sistemelor investigate
- Explice corelația dintre proprietățile fizico-chimice și aspectele energetice, farmacocinetice și farmacodinamice.
- Efectueze determinări experimentale, să sistematizeze și să interpreteze rezultatele experimentale

7. Competențe/Rezultate ale învățării

- Utilizarea corectă și corelată într-un domeniu interdisciplinar a cunoștințelor, metodelor și tehnicilor specifice analizei chimice, biochimice, fizico-chimice.
- Cunoașterea proprietăților și operarea cu noțiuni specifice de structură și reactivitate a tuturor compușilor utilizați în analizele de laborator.
- Utilizarea eficientă a resurselor informaționale, științifice și de specialitate în cariera profesională.

8. Conținut

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Bazele fizico-chimice ale farmacocineticii Parametri farmacocinetici. Modele uzuale in farmacocinetică.	Expunerea, demonstrația, conversația	3
Descrierea dinamicii unui sistem metabolic. Modele uzuale in farmacodinamică.	Expunerea, demonstrația, conversația	2
Metabolism: energie, căldură, lucru mecanic.	Expunerea, demonstrația, conversația	3
Valoarea energetică și valoarea nutrițională a unui aliment. Metode de estimare a valorilor caracteristice unui aliment.	Expunerea, demonstrația, conversația	1
Necesarul energetic al organismelor vii. Factori care afectează această mărime.	Expunerea, demonstrația, conversația	1
Absorbția, distribuția și eliminarea.	Expunerea, demonstrația, conversația	2
Descrierea structurală a sistemelor moleculare.	prelegerea, conversația, explicația, descrierea, problematizarea	2
Componentele energiei conformaționale. Suprafețe de energie potențială, structuri intermediare și de tranziție	prelegerea, conversația, explicația, descrierea	2
Tehnici și metode de optimizare conformațional-energetică a sistemelor moleculare	prelegerea, conversația, explicația, descrierea	2
Metode de investigare teoretică a proprietăților energetice ale structurilor moleculare	prelegerea, conversația, explicația, descrierea	2
Descriptori energetici utilizați în teoriile calitative ale reactivității sistemelor moleculare	prelegerea, conversația, explicația, descrierea	2
Metode și modele calitative ale chimiei folosite în investigarea teoretică a variațiilor structurale, energetice, spectrale și reactivității sistemelor moleculare	prelegerea, conversația, explicația, descrierea	2

Bibliografie

1. E. Lewars, Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Springer Nature Switzerland AG, 2024.
2. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, Chichester, 1999.
3. D.W. Rogers, Computational Chemistry Using the PC, Third Edition, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, 2003.
4. C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Edition, John Wiley & Sons Ltd, T, Chichester, 2004.
5. I. Humelnicu, Elemente de chimie teoretică, Ed. Tehnopress, Iași, 2003

6. Alexander A. Vinks, Hartmut Derendorf, Johan W. Mouton (Eds.), Fundamentals of Antimicrobial Pharmacokinetics and Pharmacodynamics, Springer, 2014.

7. Irving P. Herman, Physics of the Human Body, Springer, 2016.

8. M-O. Apostu, V. Melnig, “Bazele termodinamice ale transportului prin membrane”, Editura Universității “Al. I. Cuza”, Iași, 2008

9. M. Thellier, C. Ripoll, Bases thermodynamiques de la biologie cellulaire, MASSON, Paris, 1992;

10. P. Atkins, J. dePaula, Physical chemistry for the life sciences, Freeman, NY, 2011

8.2 Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Utilizarea datelor experimentale pentru obținerea parametrilor cinetici și termodinamici.	Explicația , conversația, problematizarea, demonstrația	4
Modele farmacocinetice și farmacodinamice.	Explicația , conversația, problematizarea, demonstrația	3
Rezolvarea problemelor directe și inverse în farmacocinetică.	Explicația , conversația, problematizarea, demonstrația	3
Determinarea conținutului energetic al alimentelor.	Explicația , conversația, problematizarea, demonstrația	2
Elemente spațiale și sisteme de coordonate caracteristice structurilor moleculare	Explicația, studiu de caz, conversația	2
Metode ale mecanicii moleculare utilizate în studiul energetic al sistemelor moleculare	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2
Determinarea teoretică a proprietăților termodinamice ce caracterizează un sistem molecular. Elemente ale dinamicii moleculare	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2
Investigarea variațiilor energetice ale unui sistem molecular. Influența mediului.	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2
Vizualizarea și interpretarea rezultatelor obținute utilizând metode ale chimiei teoretice	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2
Studiul sistemelor reactante pe calea de reacție. Suprafețe de energii potențiale	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2

Bibliografie

1. J.B. Foresman, Æleen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods - 2nd ed., Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1996

2. G. Li, Chemical Theory and Multiscale Simulation in Biomolecules: From Principles to Case Studies, Elsevier, 2024

3. D.W. Rogers, Computational Chemistry Using the PC, Wiley, Hoboken, NJ, 2003.

4. Computational Chemistry Tutorials (comp-chem.org)

5. Irving P. Herman, Physics of the Human Body, Springer, 2016.

6. M-O. Apostu, V. Melnig, “Bazele termodinamice ale transportului prin membrane”, Editura Universității “Al. I. Cuza”, Iași, 2008

7. P. Atkins, J. dePaula, Physical chemistry for the life sciences, Freeman, NY, 2011 P. Atkins, J. dePaula, Physical chemistry for the life sciences, Freeman, NY, 2011.

9. Coroborarea conținutului disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității, asociațiilor profesionale și angajatorilor reprezentativi din domeniul aferent programului

Conținutul cursului și al aplicațiilor de laborator este aliniat cerințelor asociațiilor profesionale naționale și internaționale, fiind în concordanță cu așteptările comunității, ale asociațiilor profesionale și ale angajatorilor relevanți din domeniul programului

10. Evaluare

10.1 Evaluare continuă		Pondere (min. 30%)		50	
Curs	Forma de evaluare				
	Pondere		0		
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale				
	Metode de evaluare	Detalii		Pondere	cu reexaminare

Laborator	Forma de evaluare		Verificare mixtă	
	Pondere		100	
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da	
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare
		Portofoliu	50	Da
		Test	50	Da

10.2 Evaluare finală	Pondere (max. 70%)	50
	Forma de evaluare	Verificare scrisă finală

10.3 Mențiuni (situații speciale în evaluare)	

10.4 Standard minim de performanță
- Cunoașterea principalelor aspecte ale metodelor de investigare teoretică ale dinamicii și energeticii proceselor metabolice. - Capacitatea de a corela parametrii termodinamici și cinetici cu comportamentul farmacocinetic și farmacodinamic

Data completării,
29.09.2025

Titular de curs,
Conf. Dr. MIRCEA ODIN APOSTU/
Conf. Dr. IONEL HUMELNICU

Titular de laborator,
Conf. Dr. MIRCEA ODIN APOSTU/
Conf. Dr. IONEL HUMELNICU

Data avizării în departament,

Director de departament,
Prof. Dr. MIHAIL LUCIAN BIRSA