

**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	Chimia produselor cosmetice și farmaceutice

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	Termodinamică chimică, Cinetică Chimică, Chimie cuantică și structură, Matematică
5.2 De desfășurare a laboratorului	

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 cele spectrale ale sistemele chimice studiate
- Explice și aplice principalele metode de investigare ale modelării moleculare pentru elucidarea structurii spațiale a sistemelor investigate
- Coreleze proprietățile fizico-chimice cu aspectele energetice, farmacocinetice și farmacodinamice, interpretând relațiile dintre acestea..
- Efectueze determinări experimentale, să sistematizeze și să interpreteze rezultatele obținute

7. Competențe/Rezultate ale învățării

- Capacitatea de analiză, sinteză și utilizare a metodelor științifice riguroase și a tuturor resurselor de informație în orice context profesional și social.
- Cunoașterea și operarea cu noțiuni specifice de structură, proprietăți și reactivitate a compușilor chimici, farmaceutici și cosmetici.
- Efectuarea de experimente, aplicarea riguroasă a metodelor de analiză și interpretarea rezultatelor, elaborarea protocoalelor pentru analiza fizico-chimică a unor produși chimici, farmaceutici și cosmetici.
- Realizarea unor proiecte de cercetare, de elaborare a unor articole sau studii științifice.
- Diversificarea formelor și stilurilor de învățare.

8. Conținut

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Bazele fizico-chimice ale farmacocineticii Parametri farmacocinetici. Modele uzuale în farmacocinetică.	Expunerea, demonstrația, conversația	3
Descrierea dinamicii unui sistem metabolic. Modele uzuale în 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 - Reprezentarea geometriei moleculare: coordonate interne și carteziane. - Structuri moleculare stabile, intermediare și de tranziție.	prelegerea, conversația, explicația, descrierea, problematizarea	2
Componentele energiei conformaționale - Energie de întindere, unghi, torsiune și interacțiuni non-covalente. - Factorii care influențează stabilitatea conformațională. Suprafețe de energie potențială - Conceptul de suprafață de energie potențială (PES). - Identificarea punctelor critice: minime, maxime și puncte de tranziție. - Analiza structurilor intermediare și a căilor de tranziție.	prelegerea, conversația, explicația, descrierea,	2
Tehnici și metode de optimizare conformațional-energetică a sistemelor moleculare - Metode clasice (mecanică moleculară) și cuantice (ab initio, DFT). - Criterii de convergență și metode numerice de optimizare.	prelegerea, conversația, explicația, descrierea	2
Metode de investigare teoretică a proprietăților energetice ale structurilor moleculare	prelegerea, conversația, explicația, descrierea	2

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
- Determinarea energiilor relative și a distribuțiilor conformaționale. - Calculul proprietăților fizico-chimice asociate energiei (orbitale de frontieră, momente dipolare, polarizabilitate).		
Descriptori energetici utilizați în teoriile calitative ale reactivității moleculare - Indici de reactivitate: electronegativitate, duritate, indice Fukui. - Corelarea descriptorilor cu tendințele de reacție și stabilitatea conformațională.	prelegerea, conversația, explicația, descrierea	2
Metode și modele calitative ale chimiei pentru investigarea variațiilor structurale, energetice, spectrale și reactivității - Modele semiempirice și metode QM/MM. - Aplicarea descriptorilor teoretici în analiza proprietăților moleculare și a mecanismelor de reacție.	prelegerea, conversația, explicația, descrierea	2

Bibliografie

1. E. Lewars, Computational Chemistry, Kluwer Academic Publishers, NY, 2004.
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. Alexander A. Vinks, Hartmut Derendorf, Johan W. Mouton (Eds.), Fundamentals of Antimicrobial Pharmacokinetics and Pharmacodynamics, Springer, 2014.
6. Irving P. Herman, Physics of the Human Body, Springer, 2016.
7. M-O. Apostu, V. Melnig, “Bazele termodinamice ale transportului prin membrane”, Editura Universității “Al. I. Cuza”, Iași, 2008
8. M. Thellier, C. Ripoll, Bases thermodynamiques de la biologie cellulaire, MASSON, Paris, 1992;
9. I. Humelnicu, Elemente de chimie teoretică, Ed. Tehnopress, Iași, 2003
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 - Coordonate interne și carteziene. - Reprezentarea geometrică a moleculelor și a complexelor moleculare.	Explicația, studiu de caz, conversația	2
Metode ale mecanicii moleculare utilizate în studiul energetic al sistemelor moleculare - Funcția de energie potențială conformațională. - Optimizarea geometriei și evaluarea energiei relative a conformațiilor.	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2
Determinarea teoretică a proprietăților termodinamice ale sistemelor moleculare - Calculul entalpiei, entropiei și energiei libere Gibbs. - Corelarea parametrilor termodinamici cu stabilitatea moleculară. Elemente ale dinamicii moleculare - Principiile simulării dinamice moleculare. - Evaluarea mobilității atomice și conformațională.	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2
Investigarea variațiilor energetice ale unui sistem molecular și influența mediului - Analiza efectului solvenților și a mediului asupra stabilității și	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2

8.2 Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
energiei sistemului. - Compararea rezultatelor obținute în diferite condiții de simulare.		
Vizualizarea și interpretarea rezultatelor obținute utilizând metode ale chimiei teoretice - Reprezentarea grafică a energiei, densității electronice, suprafețelor de energie potențială. - Interpretarea relației dintre structura moleculară și proprietățile energetice.	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2
Studiul sistemelor reactante pe calea de reacție și suprafețele de energie potențială - Identificarea punctelor de tranziție și a structurilor intermediare. - Analiza profilului energetic al reacției și a căilor de reacție preferențiale.	Explicația, studiu de caz, conversația, simularea	2

Bibliografie

1. J.B. Foresman, Eileen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods - 2nd ed., Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1996
2. D.W. Rogers, Computational Chemistry Using the PC, Wiley, Hoboken, NJ, 2003.
3. Irving P. Herman, Physics of the Human Body, Springer, 2016.
4. M-O. Apostu, V. Melnig, "Bazele termodinamice ale transportului prin membrane", Editura Universității "Al. I. Cuza", Iași, 2008
5. 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 sunt în concordanță cu cerințele asociațiilor profesionale naționale și internaționale de specialitate.

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
		Studiu de caz	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 utilizate în analiza dinamicii și energeticii proceselor metabolice.
- Capacitatea de a corela parametrii termodinamici și cinetici cu comportamentul farmacocinetic și farmacodinamic al sistemelor moleculare studiate.

**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**