

**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	Licență
1.6 Programul de studii / Calificarea	Biochimie tehnologică

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei			Modelarea structurii moleculare și transport prin membrane					
2.2 Titularul activităților de curs			Conf. Dr. MIRCEA ODIN APOSTU/ Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU					
2.3 Titularul activităților de seminar			Conf. Dr. MIRCEA ODIN APOSTU/ Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU					
2.4 An de studiu	III	2.5 Semestrul	VI	2.6 Tip de evaluare*	EVP	2.7 Regimul disciplinei**	Op	

*E – Examen / C – Colocviu / EVP – Evaluare pe parcurs

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

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	4.5	3.2 curs	2.5	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	54	3.5 curs	30	3.6 seminar/laborator	24
Distribuția fondului de timp					ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și altele					35
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					25
Pregătire seminare/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					16
Tutoriat					10
Examinări					10
Alte activități					0

3.7 Total ore studiu individual*	96
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, Fizică, Informatică
--

5. Condiții (dacă este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	Sală de curs dotată cu videoproiector, conexiune la internet
5.2 De desfășurare a seminarului/ laboratorului	Conexiune la internet, PC/laptop, aplicații software specifice

6. Obiective

Obiectivul general:

Dezvoltarea de abilități în modelarea geometriei moleculare și a proprietăților biomoleculelor. Înțelegerea influenței structurii asupra fenomenelor de transport prin membrane biologice.

Obiective specifice:

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

- 1) Identifice și să reprezinte grafic geometria moleculară (spațială) a unor sisteme de interes biologic
- 2) Aleagă nivelul de teorie adecvat modelării unor proprietăți moleculare de interes: geometria de echilibru și în stare de tranziție, energetica de reacție
- 3) Efectueze, folosind aplicații software specifice modelării moleculare a sistemelor moleculare de importanță biologică și să interpreteze rezultatele unor calcule (i) de structură electronică moleculară și (ii) de dinamică moleculară folosind formule clasice de energie potențială derivate din mecanica moleculară
- 4) Extragă și să interpreteze rezultatele obținute prin calcule de structură electronică și dinamică moleculară
- 5) Explice corelația structura - procese de transport prin membrane
- 6) Efectueze determinări experimentale, să sistematizeze și să interpreteze rezultatele experimentale

7. Competențe/Rezultate ale învățării

- Operarea cu noțiuni de structură și reactivitate a compușilor chimici.
- Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a unor compuși chimici.
- Efectuarea de experimente, aplicarea riguroasă a metodelor de analiză și interpretarea rezultatelor, cu respectarea normelor de securitate și sănătate în muncă.
- Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul chimiei.
- Efectuarea în manieră autonomă a analizelor și preparatelor biologice, biochimice și microbiologice și interpretarea rezultatelor.

8. Conținut

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Introducere în modelarea moleculară. Concepte fundamentale: teorie, metodă, model. Fundamentele teoretice ale calculelor de structură electronică. Tipuri de modele de calcul: clasice, cuantice, hibride	Expunerea, demonstrația, conversația	3
Metode ab initio și semiempirice utilizate în calculul structurii electronice. Baze de orbitale. Teoria funcționalei de densitate electronică (DFT): principii, funcționale de schimb-correlație și aproximațiile uzuale.	Expunerea, demonstrația, conversația	3
Interpretarea rezultatelor unui calcul de structură electronică: Proprietăți moleculare determinate pe baza energiei totale și a funcției de undă (sau densității electronice). Descriptori structurali și indici de reactivitate chimică: relații structură-activitate (SAR, QSAR) și indicatori DFT conceptuali.	Expunerea, demonstrația, conversația	3

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Suprafețe de energie potențială și topologia acestora. Structuri cheie pe SEP: minime, stări de tranziție, căi de reacție. Optimizarea geometriei și determinarea coordonatelor de reacție.	Expunerea, demonstrația, conversația	2
Mecanica și dinamica moleculară. Câmpuri de forță și metode de parametrizare. Integrarea ecuațiilor de mișcare: algoritmul Verlet și variantele sale (Velocity Verlet, Leapfrog)	Expunerea, demonstrația, conversația	4
Membrane biologice: noțiuni fundamentale ale compoziției și structurii membranare. Clasificarea membranelor.	Expunerea, demonstrația, conversația	2
Corelatarea structura-fenomene de transport. Procese membranare. Presiunea osmotica. Echilibrul Donnan.	Expunerea, demonstrația, conversația	2
Potențialul electrochimic. Potențialul electric transmembranar.	Expunerea, demonstrația, conversația	2
Potențialul de acțiune al celulei nervoase. Stratul dublu electric.	Expunerea, demonstrația, conversația	2
Difuzia liberă. Difuzia facilitată	Expunerea, demonstrația, conversația	4
Transportul activ	Expunerea, demonstrația, conversația	3

Bibliografie

1. A. Lupan, A. M. V. Brânzaniuc, R. Silaghi-Dumitrescu, Elemente de chimie computațională, Presa Universitară Clujeană, Universitatea Babeș-Bolyai, 2024
2. C. Stan Tsai, An Introduction to Computational Biochemistry, John Wiley & Sons, New York, 2002
3. D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications, Academic Press Inc., Orlando, 2001
4. M-O. Apostu, V. Melnig, “Bazele termodinamice ale transportului prin membrane”, Editura Universității “Al. I. Cuza”, Iași, 2008
5. M. E. Starzak, The physical chemistry of membranes, Academic Press, London, 1984;
6. M. Thellier, C. Ripoll, Bases thermodynamiques de la biologie cellulaire, MASSON, Paris, 1992;
7. A. Rappe, C. Casewit, Molecular Mechanics across Chemistry, University Science Books, Sausalito, California, 1997
8. R. E. Kesting, Synthetic polymeric membranes – A structural perspective, John Wiley & Sons, 1985;
9. O. Sten-Knudsen, Biological membranes - Theory of transport, potentials and electric impulses, Cambridge

8.2 Seminar / Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Elemente spațiale și sisteme de coordonate Definierea, manipularea și vizualizarea geometriei moleculare. Formate numerice de descriere a geometriei moleculare specifice utilizate în cazul sistemelor de interes biologic.	Modelarea, demonstrația, conversația	2
Calculul teoretic al energiei totale și a geometriei moleculare de echilibru. Verificarea caracterului de minim local al unei geometrii moleculare.	Modelarea, demonstrația, studiul de caz, conversația	4
Construirea și interpretarea unei suprafețe de energie potențială (SEP). Corelarea topologiei SEP cu stabilitatea structurilor cheie și mecanismele de reacție	Modelarea, demonstrația, studiul de caz, conversația	4
Parametrizarea unui câmp de forță utilizând rezultatele unor calcule ab initio. Utilizarea metodelor semi-empirice și de mecanică moleculară în analiza conformațională	Modelarea, studiul de caz, demonstrația, conversația	2
Modelarea transportului prin membrane folosind dinamica moleculară	Modelarea, studiul de caz, Observatia	2
Caracterizarea structurală a membranelor; modalități de preparare.	Experimentul, observatia	2
Studiul fenomenului de difuzie liberă.	Experimentul, observatia	2
Simularea procesului de difuzie. Ultracentrifugarea. Presiunea osmotica. Aplicații de calcul.	Experimentul, observatia	2
Proprietăți de separare ale membranelor; corelația structură - proprietăți	Experimentul, observatia	2
Membrane ion selective.	Experimentul, observatia	2

Bibliografie

1. C. Stan Tsai, An introduction to computational biochemistry, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2002
2. D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications, Academic Press Inc., Orlando, 2001
3. Hospital, A., Goñi, J. R., Orozco, M., & Gelpi, J. L. (2015). Molecular dynamics simulations: advances and applications. Advances and Applications in Bioinformatics and Chemistry, 8, 37–47.
4. M. E. Starzak, The physical chemistry of membranes, Academic Press, London, 1984
5. M-O. Apostu, V. Melnig, “Bazele termodinamice ale transportului prin membrane”, Editura Universității “Al. I. Cuza”, Iași, 2008

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%)		100
Curs	Forma de evaluare		Verificare scrisă	
	Pondere		50	
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da	
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare
		Test	100	Da
Seminar / Laborator	Forma de evaluare		Verificare mixtă	
	Pondere		50	
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da	
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare
		Verificare practică periodică	20	Da
		Test	80	Da

10.2 Mențiuni (situații speciale în evaluare)

--	--

10.3 Standard minim de performanță

- 1) Capacitatea de a construi și manipula un model numeric al geometriei biomoleculare; enumerarea și descrie componentelor energiei totale în formalismul mecanicii moleculare.
- 2) Capacitatea de a corela structura unei membrane biologice cu fenomenele de transport prin aceasta

Data
completării,
29.09.2005

Titular de curs,
Conf. Dr. MIRCEA ODIN APOSTU/ Lect. Dr.
DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU

Titular de seminar,
Conf. Dr. MIRCEA ODIN APOSTU/ Lect. Dr.
DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU

Data avizării în departament,

Director de departament,
Prof. Dr. MIHAIL LUCIAN BIRSA