

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

1.1 Instituția de învățământ superior	UNIVERSITATEA “ALEXANDRU IOAN CUZA” DIN IAȘI
1.2 Facultatea	CHIMIE
1.3 Departamentul	ȘCOALA DOCTORALĂ DE CHIMIE
1.4 Domeniul de studii	CHIMIE
1.5 Ciclul de studii	DOCTORAT
1.6 Programul de studii / Calificarea	DOCTOR ÎN CHIMIE

**2. Date despre disciplină**

2.1 Denumirea disciplinei	TEHNICI EXPERIMENTALE, PRELUCRAREA ȘI INTERPRETAREA REZULTATELOR CERCETĂRII – MODULUL II						
2.2 Titularul activităților de curs							
2.3 Titularul activităților de seminar							
2.4 An de studiu	I	2.5 Semestru	1	2.6 Tip de evaluare	C	2.7 Regimul disciplinei	OP

\* OB – Obligatoriu / OP – Opțional

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	2.25	din care: 3.2. curs	1.25	3.3. seminar	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	31.5	din care: 3.5. curs	17.5	3.6. seminar	14
Distribuția fondului de timp					ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și altele					10
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					15
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					10
Tutoriat					4.5
Examinări					4
Alte activități					-
3.7 Total ore studiu individual					43.5
3.8 Total ore pe semestru					75
3.9 Număr de credite					3

**4. Precondiții (dacă este cazul)**

4.1 De curriculum	
4.2 De competențe	

**5. Condiții (dacă este cazul)**

5.1 De desfășurare a cursului	
5.2 De desfășurare a laboratorului	

## 6. Competențe specifice acumulate

<b>Competențe profesionale</b>	<p>Evaluarea critic-constructivă a proiectelor și a rezultatelor cercetării științifice, aprecierea stadiului cunoașterii teoretice și metodologice; identificarea priorităților de cunoaștere și aplicative domeniului; Selecția și aplicarea de principii, teorii și metode avansate de cunoaștere, transfer de metode dintr-un domeniu într-altul, abordări interdisciplinare pentru a rezolva probleme teoretice și practice, noi și complexe;</p> <p>Utilizarea de principii și metode avansate pentru explicarea și interpretarea, din perspective multiple, a unor situații/ probleme teoretice și practice noi și complexe, specifice domeniului;</p> <p>Cunoașterea sistematică, avansată a conceptelor, a metodelor de cercetare, a controverselor și a noilor ipoteze specifice domeniului; comunicarea cu specialiștii din domenii conexe.</p>
<b>Competențe transversale</b>	<p>Dezvoltarea unor proiecte centrate pe creativitate, ca teme al autorealizării;</p> <p>Asumarea responsabilității și capacitatea de organizare și conducere a activității grupurilor profesionale, de cercetare științifică sau a unor organizații/instituții;</p> <p>Inițierea și dezvoltarea inovatoare de proiecte teoretice și practice complexe.</p>

## 7. Obiectivele disciplinei (din grila competențelor specifice acumulate)

<b>7.1. Obiectivul general</b>	<p>Cursul își propune să ajute studenții de la școala doctorală să identifice cu ușurință metode avansate de prelucrare matematică a datelor experimentale obținute în cadrul cercetării, și rolul important al acestora în diseminarea rezultatelor. Cursul va prezenta principalele metode și instrumente software care ar putea fi utilizate în prelucrarea datelor experimentale. În plus cursul dorește informarea studenților doctoranzi, cu privire la existența unei varietăți importante de instrumente și programe care permit și facilitează prelucrarea, vizualizarea și interpretarea bazelor de date obținute în timpul cercetării din cadrul activităților doctorale.</p>
<b>7.2. Obiectivele specifice</b>	<p>La finalizarea cu succes a acestei discipline, studenții vor fi cunoaște:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ care sunt principalele tehnici generatoare de baze de date complexe și de mari dimensiuni;</li> <li>▪ care sunt principalele metode de obținere a corelațiilor între datele experimentale;</li> <li>▪ care sunt instrumentele folosite pentru facilitarea procesării bazelor de date;</li> <li>▪ care sunt principalele instrumente de vizualizare și reprezentare grafică a datelor experimentale</li> <li>▪ care sunt modalitățile de asigurare a cerințelor privind proprietatea intelectuală în cazul utilizării de programe specializate;</li> </ul>

## 8. Conținut

8.1	Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
1.	Tehnici experimentale generatoare de baze de date complexe sau de mari dimensiuni	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea	(4,5 ore, [1-4])
2.	Metode avansate de prelucrare matematică a datelor experimentale brute	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea	(4 ore, [1-4])
3.	Corelarea datelor experimentale folosind metode statistice și algoritmi matematici	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea	(4,5 ore, [1-4])
4.	Instrumente software pentru facilitarea procesării datelor experimentale	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea	(4,5 ore, [5-7])
<b>Bibliografie</b>			
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Li, X, Dorman, F. L., Helm, P. A., Kleywegt, S., Simpson, A., Simpson, M. J., Jobst, K. J., Nontargeted screening using gas chromatography atmospheric pressure ionization mass spectrometry: recent trends and emerging potential. <i>Molecules</i>, 26, 6911, <b>2021</b>.</li> <li>2. Fred, E., Szabo, C, Editor(s): Fred E. Szabo, <i>The Linear Algebra Survival Guide</i>, Academic Press, Pages 47-77, ISBN 9780124095205, <a href="https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409520-5.50010-2">https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409520-5.50010-2</a>, <b>2015</b>.</li> </ol>			

			<ol style="list-style-type: none"> <li>Pluskal, T., Castillo, S., Villar-Briones, A. and Oresic, M., MZmine 2: modular framework for processing, visualizing, and analyzing mass spectrometry-based molecular profile data, BMC Bioinformatics, 11, 395, 2010.</li> <li>Jolliffe, I.T., Cadima J., Principal component analysis: A review and recent developments. Philos Trans R Soc A, 2016.</li> <li>Norris, G., Duvall, R., Brown, S., Bai, S., EPA Positive Matrix Factorization (PMF) 5.0 Fundamentals and User Guide, Environmental Protection Agency Office of Research and Development, Publishing House Washington, DC 20460, 2014.</li> <li>Wiley's KnowItAll Software as a Spectral Interpretation Tool, <a href="https://sciencesolutions.wiley.com/whitepapers-case-studies/">https://sciencesolutions.wiley.com/whitepapers-case-studies/</a></li> <li>Tools for Igor Pro® Users: <a href="https://www.wavemetrics.com/users/tools">https://www.wavemetrics.com/users/tools</a></li> </ol>
<b>8.2</b>	<b>Seminar</b>	<b>Metode de predare</b>	<b>Observații</b> (ore și referințe bibliografice)
1.	Prelucrarea datelor complexe obținute prin tehnici ale spectrometriei de masă cuplată cu tehnici cromatografice	Prelegerea, Explicația, Conversația Descrierea, Problematizarea	(2 ore, [1-4])
2.	Prelucrarea datelor experimentale brute: medierea datelor, normalizarea datelor, procesarea spectrelor IR, procesarea spectrelor de masă	Prelegerea, Explicația, Conversația Descrierea, Problematizarea	(2 ore, [1-4])
3.	Matricea de corelație, analiza de component principal și factorizarea matricială pozitivă în prelucrarea datelor	Prelegerea, Explicația, Conversația Descrierea, Problematizarea	(2 ore, [1-4])
4.	Programe software implicate în optimizarea procesării datelor: KnowItAll, Igor Pro, Origin, SigmaPlot	Prelegerea, Explicația, Conversația Descrierea, Problematizarea	(2 ore, [4-8])
5.	Utilizarea de programe specializate în analiza datelor KnowItAll, MZmine	Prelegerea, Explicația, Conversația Descrierea, Problematizarea	(2 ore, [4-8])
6.	Posibilități de reprezentare grafică a datelor experimentale utilizând Origin, ChemDraw, CorelDraw	Prelegerea, Explicația, Conversația Descrierea, Problematizarea	(2 ore, [4-8])
7.	Modalități de asigurare a cerințelor privind proprietatea intelectuală în cazul utilizării de programe specializate	Prelegerea, Explicația, Conversația Descrierea, Problematizarea	(2 ore, [4-8])
<b>Bibliografie</b>			
<ol style="list-style-type: none"> <li>Fred, E., Szabo, C, Editor(s): Fred E. Szabo, The Linear Algebra Survival Guide, Academic Press, Pages 47-77, ISBN 9780124095205, <a href="https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409520-5.50010-2">https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409520-5.50010-2</a>, 2015.</li> <li>Pluskal, T., Castillo, S., Villar-Briones, A. and Oresic, M., MZmine 2: modular framework for processing, visualizing, and analyzing mass spectrometry-based molecular profile data, BMC Bioinformatics, 11, 395, 2010.</li> <li>Jolliffe, I.T., Cadima J., Principal component analysis: A review and recent developments. Philos Trans R Soc A, 2016.</li> <li>Norris, G., Duvall, R., Brown, S., Bai, S., EPA Positive Matrix Factorization (PMF) 5.0 Fundamentals and User Guide, Environmental Protection Agency Office of Research and Development, Publishing House Washington, DC 20460, 2014.</li> <li>Introduction to Igor Pro: <a href="https://www.wavemetrics.net/doc/igorman/I-01%20Intro.pdf">https://www.wavemetrics.net/doc/igorman/I-01%20Intro.pdf</a></li> <li>Tools for Igor Pro® Users: <a href="https://www.wavemetrics.com/users/tools">https://www.wavemetrics.com/users/tools</a></li> <li>Origin user guide: <a href="https://www.originlab.com/doc/User-Guide">https://www.originlab.com/doc/User-Guide</a></li> <li>Wiley Rights &amp; Permissions Portal: <a href="https://www.wiley.com/en-us/permissions">https://www.wiley.com/en-us/permissions</a></li> </ol>			

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

După parcurgerea și promovarea disciplinei, studentul va avea cunoștințele necesare pentru a putea selecta metode și instrumente de prelucrare a datelor și va cunoaște ce trebuie să facă pentru a evita apariția unei probleme de etică și integritate în cercetare în momentul utilizării acestora pentru realizarea unui manuscris științific.

## 10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere în nota finală (%)
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor –înțelegerea și aplicarea corectă a problematicii tratate la curs.	Colocviu – Prelegere despre principalele tehnici experimentale generatoare de baze de date complexe sau de mari dimensiuni.	70
10.5 Seminar	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar.	Prelegere despre modul de utilizare a instrumentelor de procesare a datelor în cercetare.	30
<b>10.6 Standard minim de performanță</b>			
<ul style="list-style-type: none"><li>▪ Identificarea principalelor metode și instrumente de prelucrare și analiză a datelor complexe sau de mari dimensiuni;</li><li>▪ Alegerea unui instrument software potrivit în procesarea datelor experimentale din domeniul de cercetare doctorală;</li></ul>			

Data completării      Titular de curs  
26.09.2024

Titular de Seminar

Data avizării

Director Școala Doctorală de Chimie  
Prof. univ. dr. habil. Cecilia ARSENE