

Universitatea "Al.I. Cuza" Iași
Facultatea de Chimie
Catedra de Chimie fizică, teoretică și chimia materialelor

PROGRAMA ANALITICĂ

a cursului "Biochimie cuantică"

Cod CF3612

Specializarea: Biochimie tehnologică, anul de studii III,
semestrul II, număr ore de curs 2, număr ore laborator 2,
anul universitar 2008/2009

Obiectivele cursului:

Cursul prezintă studenților unele teorii ale chimiei și biochimiei cuantice necesare pentru înțelegerea structurii și reactivității moleculare. Se pune accent pe calculul unor parametri necesari pentru determinarea reactivității chimice și a activității biologice a unor centre de reacție precum și modelarea computațională a structurilor moleculare a unor molecule ce prezintă un deosebit interes din punct de vedere biologic.

1. Metode de evaluare a structurii chimice:
 - 1.1 Evaluarea structurii moleculare prin masuratori experimentale;
 - 1.2 Calcule parametrizate empiric utilizate pentru evaluarea structurii moleculare (Mecanica moleculara);
 - 1.3 Metode ale chimiei cuantice (Notiuni de chimie cuantica, Metodele Ab-initio si DFT, Metode semiempirice);
 - 1.4 Dinamica sistemelor moleculare. Dinamica moleculara a compușilor biochimici;
 - 1.5 Reactivitatea chimică (Teoria perturbatiei, Clasificarea reactiilor chimice, Reactii termice, Reactii fotochimice).

2. Structura electronică și reactivitatea moleculelor de interes biologic
 - 2.1. Structura și reactivitatea aminoacizilor și a unor proteine
 - 2.2. Structura acizilor nucleici
 - 2.3. Enzime - structură și reactivitate
 - 2.4. Lipide. Structura și reactivitatea acizilor grași
 - 2.5. Vitamine - structură, reactivitate chimică, activitate biologică
 - 2.6. Metode de evaluare a bioreactivității medicamentelor

Sistemul de evaluare al studentului: examen

Discipline care trebuie parcurse în prealabil:

- obligatorii: Structura atomilor și moleculelor

BIBLIOGRAFIE CURS

1. Molecular Mechanics acrosss Chemistry, A.K. Rappe, C.J.Casewit, University Science Books, 1997
2. Computational Approaches to Biochemical Reactiviti,G.N. Szabo, A.W. Warshel, Kulver Academic Publishers, 2001
3. Laboratory Exercises Using Hyperchem, M.L. Caffery, P. A. Dobosh, D. M. Richardson, Hypercube 1998
4. Computational Biochemistry and Biophysics, O.M. Becker, A.D. Mackerell, B.Roux, Ed. Marcell Dekker 2001.
5. A.Chiriac, D. Ciubotariu, Z. Simon, “Relații calitative structură chimică-activitate biologică (QSAR). Metoda MTD”, Editura Mirton, Timișoara, 1996.
6. M.Constantinescu. Inițiere în structura moleculară. Orbitale moleculare în chimie, Editura Tehno Press 2003
7. V.Em. Sahini, Mihaela Hillebrand, “Chimie cuantică în exemple și aplicații”, Editura Academiei, București, 1985.
8. L. Lehninger, Biochimie, vol. I and II, Edit. Tehnică, București, 1987, 1992.

Tematica lucrărilor de laborator:

1. Metode de evaluare a structurii chimice
2. Parametrii de reactivitate chimica
3. Dinamica moleculară.
4. Regulile Wdoard-Hoffman
5. Dinamica moleculara a proteinelor
6. Dinamica moleculara a aminoacizilor
7. Prezicerea activității biologice a compușilor chimici. Medicamente

Tematica lucrărilor de seminar:

1. Măsurători experimentale de structură chimică
2. Bazele teoretice ale chimiei cuantice
3. Fundamentele mecanicii moleculare
4. Evoluția energetică a sistemelor moleculare pe calea de reacție
5. Mecanisme de reacție chimică și biochimică.
6. Parametri structurali ai medicamentelor

Titular de disciplină,

Prof.dr. Mircea Constantinescu