

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Politehnica Timișoara
1.2 Facultatea ¹ / Departamentul ²	Chimie Industrială și Ingineria Mediului / Chimie Aplicată și Ingineria Compușilor Organici și Naturali
1.3 Domeniul de studii (denumire/cod ³)	Inginerie Chimică / 10.30.50
1.4 Ciclul de studii	Licență
1.5 Programul de studii (denumire/cod/calificarea)	Ingineria și informatica proceselor chimice și biochimice / 10.30.50.50 / expert inginer chimist

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei/Categoria formativă ⁴	Baze de date chimice și biochimice / DS						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. Dr. Ing. Daniel HĂDĂRUGĂ						
2.3 Titularul activităților aplicative ⁵	Prof. Dr. Ing. Daniel HĂDĂRUGĂ						
2.4 Anul de studii ⁶	3	2.5 Semestrul	5	2.6 Tipul de evaluare	D	2.7 Regimul disciplinei ⁷	DO

3. Timp total estimat - ore pe semestru: activități didactice directe (asistate integral sau asistate parțial) și activități de pregătire individuală (neasistate)⁸

3.1 Număr de ore asistate integral/săptămână	3 , format din:	3.2 ore curs	1.5	3.3 ore seminar/laborator/proiect	1.5
3.1* Număr total de ore asistate integral/sem.	42 , format din:	3.2* ore curs	21	3.3* ore seminar/laborator/proiect	21
3.4 Număr de ore asistate parțial/săptămână	, format din:	3.5 ore practică		3.6 ore elaborare proiect de diplomă	
3.4* Număr total de ore asistate parțial/semestru	, format din:	3.5* ore practică		3.6* ore elaborare proiect de diplomă	
3.7 Număr de ore activități neasistate/săptămână	3 , format din:	ore documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren			1
		ore studiu individual după manual, suport de curs, bibliografie și notițe			1
		ore pregătire seminarii/laboratoare, elaborare teme de casă și referate, portofolii și eseuri			1
3.7* Număr total de ore activități neasistate/semestru	42 , format din:	ore documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren			14
		ore studiu individual după manual, suport de curs, bibliografie și notițe			14
		ore pregătire seminarii/laboratoare, elaborare teme de casă și referate, portofolii și eseuri			14
3.8 Total ore/săptămână ⁹					6
3.8* Total ore/semestru					84
3.9 Număr de credite					4

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> • Informatică aplicată • Chimie organică I și II • Grafică asistată de calculator
-------------------	---

¹ Se înscrie numele facultății care gestionează programul de studiu căruia îi aparține disciplina.

² Se înscrie numele departamentului căruia i-a fost încredințată susținerea disciplinei și de care aparține titularul cursului.

³ Se înscrie codul prevăzut în HG – privind aprobarea Nomenclatorului domeniilor și al specializărilor/programelor de studii, actualizată anual.

⁴ Disciplina se încadrează potrivit planului de învățământ în una dintre următoarele categorii formative: disciplină fundamentală (DF), disciplină de domeniu (DD), disciplină de specialitate (DS) sau disciplina complementară (DC).

⁵ Prin activități aplicative se înțeleg activitățile de: seminar (S) / laborator (L) / proiect (P) / practică (Pr).

⁶ Anul de studii în care este prevăzută disciplina în planul de învățământ.

⁷ Disciplina poate avea unul din următoarele regimuri: disciplină impusă (DI) sau disciplină obligatorie (DOb)-pentru alte domenii fundamentale de studii oferite de UPT, disciplină opțională (DO) sau disciplină facultativă (Df).

⁸ Numărul de ore de la rubricile 3.1*, 3.2*,...,3.8* se obțin prin înmulțirea cu 14 (săptămâni) a numărului de ore din rubricile 3.1, 3.2,..., 3.8. Informațiile din rubricile 3.1, 3.4 și 3.7 sunt chei de verificare folosite de ARACIS sub forma: (3.1)+(3.4) ≥ 28 ore/săpt. și (3.8) ≤ 40 ore/săpt.

⁹ Numărul total de ore / săptămână se obține prin însumarea numărului de ore de la punctele 3.1, 3.4 și 3.7.

	<ul style="list-style-type: none"> • Biochimie
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> • -

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> • Participarea studenților la orele de curs și la prelegeri se va efectua conform regulamentului din ANEXA LA H.S. NR. 233 din 15.09.2016, ANEXA nr. 4 la Carta UPT în vigoare. Cursul se desfășoară în locația: Timișoara, Carol Telbisz 6, Sala 302 / 303 / ACD sau online, funcție de condițiile sanitare. Nu va fi tolerată întârzierea studenților la curs fără un motiv bine întemeiat, întrucât aceasta se dovedește disruptivă la adresa procesului educațional.
5.2 de desfășurare a activităților practice	<ul style="list-style-type: none"> • Participarea studenților la lucrările practice, precum și recuperările acestora, se va efectua conform regulamentului din ANEXA LA H.S. NR. 233 din 15.09.2016, ANEXA nr. 4 la Carta UPT în vigoare, cu (1) respectarea normelor și instrucțiunilor de protecție a muncii în laborator, (2) elaborarea și susținerea unui referat/proiect pe o temă acordată la prima ședință de laborator, (3) efectuarea lucrărilor practice de laborator de către studenți este condiționată de însușirea unor minime cunoștințe prezentate în referatul de laborator. În acest sens studenții vor susține teste de laborator înainte de fiecare lucrare practică iar nota minimă pentru efectuarea practică a lucrării trebuie să fie 5,00. În caz contrar studentul ia la cunoștință ca nu poate participa la lucrarea practică, aceasta urmând să fie recuperată în ședințele separate conform regulamentului din ANEXA LA H.S. NR. 233 din 15.09.2016, ANEXA nr. 4 la Carta UPT în vigoare. Activitățile practice se desfășoară în locația: Timișoara, Carol Telbisz 6, Laborator „Aplicații software 2”. Termenul predării referatului aferent lucrării de laborator este stabilit de titular de comun acord cu studenții. Nu se vor accepta cererile de amânare a acestuia pe motive altfel decât obiectiv întemeiate.

6. Competențe la formarea cărora contribuie disciplina

Competențe specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul bazelor de date chimice și biochimice; • Descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei, ingineriei chimice și al aplicării instrumentelor informatice moderne specifice bazelor de date chimice și biochimice; • Exploatarea proceselor și instalațiilor cu aplicarea cunoștințelor din domeniul ingineriei chimice utilizând sistemele informatice specifice și proiectarea asistată de calculator, cu utilizarea bazelor de date chimice și biochimice; • Descrierea, analiza și utilizarea noțiunilor de structură și reactivitate ale compușilor chimici utilizând sistemele informatice specifice, precum și a bazelor de date chimice și biochimice specifice; • Exploatarea asistată de calculator a echipamentelor și metodelor de analiză și caracterizare specifice produselor chimice, utilizând și baze de date chimice și biochimice; • În concluzie, competențele specifice asigurate de programul de studii din care face parte disciplina sunt de cunoaștere, înțelegere a conceptelor, teoriilor și metodelor din aria bazelor de date chimice și biochimice, respectiv de utilizare în comunicarea profesională în ceea ce privește aspectele fundamentale și cu caracter practic-aplicativ a acestor baze de date. Absolventul va avea abilitatea de aplicare a principiilor și metodelor de bază pentru rezolvarea problemelor/situațiilor din domeniul bazelor de date chimice și biochimice, de utilizare adecvată a criteriilor și metodelor standard de evaluare, pentru a aprecia calitatea, meritele și limitele unor procese, programe, proiecte, concepte, metode și teorii, respectiv de elaborare de proiecte profesionale cu utilizarea unor principii și metode consacrate în domeniu.
Competențele profesionale în care se înscriu competențele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul științelor ingineresti; • Descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei, ingineriei chimice și al aplicării instrumentelor informatice moderne; • Exploatarea proceselor și instalațiilor cu aplicarea cunoștințelor din domeniul ingineriei chimice utilizând sistemele informatice specifice și proiectarea asistată de calculator; • Descrierea, analiza și utilizarea noțiunilor de structură și reactivitate ale compușilor chimici utilizând sistemele informatice specifice, precum și a bazelor de date chimice și biochimice; • Exploatarea asistată de calculator a echipamentelor și metodelor de analiză și caracterizare specifice produselor chimice; • Evaluarea metodelor și practicilor elementare de management, marketing și antreprenariat;

Competențele transversale în care se înscriu competențele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Executarea sarcinilor profesionale conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit și cu îndrumare calificată; • Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate; • Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare.
---	---

7. Obiectivele disciplinei (asociate competențelor de la punctul 6)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Obiectivul disciplinei este de a aduce contribuții din domeniul bazelor de date chimice și biochimice cu implicații în cunoașterea, înțelegerea conceptelor, teoriilor și metodelor de baza din ingineria chimică și biochimică, respectiv utilizarea adecvată în comunicarea profesională, la utilizarea cunoștințelor de bază pentru explicarea și interpretarea unor variate tipuri de concepte, situații, procese, sau proiecte asociate domeniului.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Obiectivele specifice asigurate de programul de studii din care face parte disciplina sunt de cunoaștere, înțelegere a conceptelor, teoriilor și metodelor din aria bazelor de date chimice și biochimice, de reprezentare computerizată a structurilor chimice/biochimice, de codificare a acestora pentru implementare în baze de date, de utilizare/aplicare a bazelor de date chimice și biochimice/biologice consacrate la nivel internațional. Absolventul va avea abilitatea de aplicare a principiilor și metodelor de baza pentru rezolvarea problemelor/situațiilor din domeniul bazelor de date chimice și biochimice, de utilizare adecvată a criteriilor și metodelor standard de evaluare, pentru a aprecia calitatea, valoarea și limitele unor procese, programe, proiecte, concepte, metode și teorii, respectiv de elaborare de proiecte profesionale cu utilizarea unor principii și metode consacrate în domeniu.

8. Conținuturi¹⁰

8.1 Curs	Număr de ore	Metode de predare ¹¹
1. Introducere, concepte, definiția și clasificarea bazelor de date, baze de date chimice și biochimice/biologice	1	Prelegere, inclusiv cu utilizarea metodelor moderne de prezentare (videoproiecție, resurse în format electronic, prezentare online). Abordări interactive ale unor aspecte exemplificative.
2. Baze de date chimice – fundamente ale bazelor relaționale	2	
3. Query de căutare – structurare și limbaje (SQL)	2	
4. Sisteme de management al bazelor de date chimice, interfața SQL în diferite limbaje de programare	2	
5. Stocarea datelor, căutare și prelucrare în baze de date chimice	2	
6. Reprezentarea computerizată a structurilor moleculare (reprezentări SMILES, SMARTS, InChI etc.)	2	
7. Fragmente moleculare și amprente moleculare, evaluarea similarității, calculul proprietăților bazate pe fragmente moleculare	2	
8. Reacții și transformări chimice (unimoleculare, multi-moleculare)	2	
9. Structuri moleculare tridimensionale, formate de fișiere, import-export, conversii, conformații etc.)	2	
10. Baze de date biochimice / biologice – componente, caracteristici, tipuri	2	
11. Exemple de baze de date chimice și biochimice/biologice – aplicații (PubChem, DrugBank, ChemSpider, ChEMBL, ChEBI, PDB, SwissProt, NCBI, GenBank, EMBL etc.)	2	

Bibliografie¹²

1. Olah, M.; Rad, R.; Ostopovici, L.; Bora, A.; Hădăruță, N.G.; **Hădăruță, D.**; Moldovan, R.; Fuliș, A.; Mracec, M.; Oprea, T.I., WOMBAT and WOMBAT-PK: Bioactivity databases for lead and drug discovery (Expanding the genetic code. Chemical informatics); In: *Chemical Biology: From Small Molecules to Systems Biology and Drug Design*, Wiley-VCH, New York, 2007, pp. 760-786, ISBN-10: 352-731-150-5, ISBN-13: 978-352-731-150-7, URL:

¹⁰ Se detaliază toate activitățile didactice prevăzute prin planul de învățământ (tematicile prelegerilor și ale seminariilor, lista lucrărilor de laborator, conținuturile etapelor de elaborare a proiectelor, tematica fiecărui stagiu de practică). Titlurile lucrărilor de laborator care se efectuează pe standuri vor fi însoțite de notația „(*)”.

¹¹ Prezentarea metodelor de predare va include și folosirea noilor tehnologii (e-mail, pagină personalizată de web, resurse în format electronic etc.).

¹² Cel puțin un titlu trebuie să aparțină colectivului disciplinei iar cel puțin un titlu trebuie să se refere la o lucrare de referință pentru disciplină, de circulație națională și internațională, existentă în biblioteca UPT.

<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/9783527619375>, doi: <https://doi.org/10.1002/3527603743.ch9>

2. Selzer, P.M.; Marhöfer, R.J.; Koch, O., Applied Bioinformatics. An Introduction, Springer, Cham, 2018 (Biblioteca UPT).
3. Zhou, X.; Wong, S.T.C., Computational systems bioinformatics: Methods and biomedical applications, World Scientific, New Jersey, 2008, <https://doi.org/10.1142/6467> (Biblioteca UPT)
4. O'Donnell, T.J., Design and use of relational databases in chemistry, CRC Press, Boca Raton, 2009
5. Byron, K.; Herbert, K.G.; Wang, J.T.L., Bioinformatics Database Systems, CRC Press, Boca Raton, 2017
6. Herbert, K.G.; Spirollari, J.; Wang, J.T.L.; Piel, W.H.; Westbrook, J.; Barker, W.C.; Hu, Z.-Z.; Wu, C.H., Bioinformatic Databases. In: *Wiley Encyclopedia of Computer Science and Engineering*, Wah, B. (Ed.), John Wiley & Sons, Inc., New York, 2008.

8.2 Activități aplicative ¹³	Număr de ore	Metode de predare
1. Codificarea structurilor chimice utilizând reprezentări SMILES și InChI – aplicații pentru medicamente și compuși bioactivi	2	Prezentarea problemei aplicative, discutii privind activitatea aplicativa (lucrare experimentală) și NTS-PSI. Efectuarea lucrării propriu-zise. Evaluare/calcul, discutii și concluzii.
2. Utilizarea bazelor de date chimice PubChem și ChemSpider pentru selecția unor structuri după query-uri și alți parametri specifici	4	
3. Utilizarea bazelor de date chimice ChEMBL, ChEBI pentru selecția unor clase de structuri chimice cu activitate antioxidantă	4	
4. Utilizarea bazei de date chimice DrugBank pentru selecția unor clase de structuri chimice medicamentoase	4	
5. Utilizarea bazelor de date biochimice/biologice PDB și SwissProt pentru selecția unor proteine receptor specifice, pe baza diverselor input-uri de căutare	4	
6. Facilități oferite de bazele de date biochimice/biologice NCBI, GenBank, EMBL. Prezentarea rapoartelor experimentale.	3	

Bibliografie¹⁴

1. Zhou, X.; Wong, S.T.C., Computational systems bioinformatics: Methods and biomedical applications, World Scientific, New Jersey, 2008, <https://doi.org/10.1142/6467> (Biblioteca UPT)
2. Hădărugă, D.I., *Relații structură-proprietăți în clasa substanțelor odorante*, Teză de doctorat, Coordonator Științific Acad. Prof. Dr. Zeno SIMON, Universitatea de Vest din Timișoara, domeniul "Chimie", 2003
3. Olah, M.; Rad, R.; Ostopovici, L.; Bora, A.; Hădărugă, N.G.; Hădărugă, D.; Moldovan, R.; Fulias, A.; Mracec, M.; Oprea, T.I., WOMBAT and WOMBAT-PK: Bioactivity databases for lead and drug discovery (Expanding the genetic code. Chemical informatics); In: *Chemical Biology: From Small Molecules to Systems Biology and Drug Design*, Wiley-VCH, New York, 2007, pp. 760-786, ISBN-10: 352-731-150-5, ISBN-13: 978-352-731-150-7, URL: <http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/9783527619375>, doi: <https://doi.org/10.1002/3527603743.ch9>
4. O'Donnell, T.J., Design and use of relational databases in chemistry, CRC Press, Boca Raton, 2009
5. *** PubChem – Explore Chemistry, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>, 2022
6. *** DrugBank, <https://www.drugbank.com/>, 2022
7. *** Chemical Entities of Biological Interest, ChEMBI, <https://www.ebi.ac.uk/chebi/>, 2022
8. *** ChEMBL, <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>, 2022
9. *** ChemSpider - Search and share chemistry, <http://www.chemspider.com/>, 2022
10. *** Protein Data Bank, PDB, <https://www.rcsb.org/>, 2022
11. *** Expasy - UniProtKB/Swiss-Prot, <https://www.expasy.org/resources/uniprotkb-swiss-prot>, 2022
12. *** National Center for Biotechnology Information, NCBI, <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/>, 2022

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

- Conținutul disciplinei este în concordanță cu nivelul așteptărilor și cercetărilor actuale din domeniul bazelor de date chimice și biochimice, atât a comunității științifice internaționale (implicarea studenților în studii teoretice care implică baze de date), cât și a asociațiilor profesionale și a angajatorilor reprezentativi (se organizează întâlniri comune prin intermediul Comitetului Director al Universității Politehnica Timișoara, din care fac parte reprezentanți importanți ai mediului de afaceri din România și Europa; colaboratorii și angajatorii din domeniu au un interes deosebit pentru studenții/absolvenții care au competențele date de această disciplină, care combină aspectele de chimie și biochimie cu cele de informatică).

10. Evaluare

¹³ Tipurile de activități aplicative sunt cele precizate în nota de subsol 5. Dacă disciplina conține mai multe tipuri de activități aplicative atunci ele se trec consecutiv în liniile tabelului de mai jos. Tipul activității se va înscrie într-o linie distinctă sub forma: „Seminar:”, „Laborator:”, „Proiect:” și/sau „Practică:”.

¹⁴ Cel puțin un titlu trebuie să aparțină colectivului disciplinei.

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare ¹⁵	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Verificarea finală a cunoștințelor se face prin evaluare distribuită (cel puțin trei teste a câte o oră, cu un număr de minimum cinci subiecte/probleme pentru fiecare test, care să acopere părțile teoretice/aplicative în raport egal, prin care se verifică competențele și abilitățile dobândite), în urma căreia se obține nota la evaluare distribuită, ca medie aritmetică a testelor. Nota maximă se obține la rezolvarea tuturor întrebărilor/subiectelor, iar nota minimă de promovare, nota 5, la rezolvarea corectă a jumătate din fiecare set (test) de întrebări/subiecte teoretice/aplicative.	Promovarea evaluării distribuite la disciplină presupune rezolvarea a minimum jumătate din fiecare set de subiecte: teoretice și aplicative. Conform regulamentului de organizare și desfășurare a procesului de învățământ de formare inițială din Universitatea <i>Politehnica</i> Timișoara, nota finală se stabilește cu formula: Nota finală = parte întreagă din $(k1 \cdot e + k2 \cdot p + 0.5)$ unde: e – nota la evaluarea distribuită; p – nota pentru activitatea pe parcurs; k1, k2 – coeficienți de ponderare cu proprietățile: $k1 + k2 = 1$ și $k2 \geq (k1)/2$. Pentru această disciplină coeficienții k1 și k2 sunt: $k1 = 0.66$, $k2 = 0.34$.	66%
10.5 Activități aplicative	S: L: În cadrul orelor de lucrări de laborator se apreciază prin discuții și teste specifice modul de însușire a practicii de laborator din domeniul bazelor de date studiate. Media testelor, respectiv a referatelor (elaborare și susținere) reprezintă fiecare câte 50% din nota pentru activitatea practică. P¹⁶: Pr:	Promovarea activității pe parcurs la disciplină presupune rezolvarea a minimum jumătate din fiecare set de subiecte din cadrul testelor de la lucrările de laborator, respectiv a referatelor. Notele obținute la teste, cele obținute în urma discuțiilor referatelor întocmite pe baza lucrărilor de laborator, precum și activitatea la curs, constituie baza pentru nota la activitatea pe parcurs.	34%
10.6 Standard minim de performanță (se prezintă cunoștințele minim necesare pentru promovarea disciplinei și modul în care se verifică stăpânirea lor ¹⁷)			
<ul style="list-style-type: none"> Promovarea evaluării distribuite la disciplină presupune rezolvarea a minimum jumătate din fiecare set de subiecte: teoretice și aplicative. În plus, este necesară efectuarea tuturor lucrărilor de laborator și rezolvarea a minimum jumătate din subiectele aferente fiecărui set de subiecte/proiect din cadrul lucrărilor de laborator. 			

Data completării

6.09.2022

**Titular de curs
(semnătura)**

Prof. Dr. Ing. Daniel HĂDĂRUGĂ

**Titular activități aplicative
(semnătura)**

Prof. Dr. Ing. Daniel HĂDĂRUGĂ

**Director de departament
(semnătura)**

Șef lucrări Dr. Ing. Andra TĂMAȘ

Data avizării în Consiliul Facultății¹⁸

14.12.2022

**Decan
(semnătura)**

Conf. Dr. Ing. Mihai MEDELEANU

¹⁵ Fișele disciplinelor trebuie să conțină procedura de evaluare a disciplinei cu precizarea criteriilor, a metodelor și a formelor de evaluare, precum și cu precizarea ponderilor atribuite acestora în nota finală. Criteriile de evaluare se formulează în mod distinct pentru fiecare activitate prevăzută în planul de învățământ (curs, seminar, laborator, proiect). Ele se vor referi și la formele de verificare pe parcurs (teme de casă, referate ș.a.)

¹⁶ În cazul când proiectul nu este o disciplină distinctă, în această rubrică se va preciza și modul în care rezultatul evaluării proiectului condiționează admiterea studentului la evaluarea finală din cadrul disciplinei.

¹⁷ Nu se va explica cum se acorda nota de promovare.

¹⁸ Avizarea este precedată de discutarea punctului de vedere al board-ului de care aparține programul de studii cu privire la fișa disciplinei.