

### FIȘA DISCIPLINEI

DENUMIREA DISCIPLINEI	<b>Cercetari actuale in modelarea moleculara</b>	COD:
-----------------------	--	------

CICLU MASTER	ANUL DE STUDIU <b>I</b>	SEMESTRUL <b>I</b>	STATUTUL DISCIPLINEI (F-fundamentala / S-specializare / C-complementara) <b>S</b>	TIPUL DISCIPLINEI (OB-obligatorie / opt-optionala / fac-facultativa) <b>OB</b>
--------------	----------------------------	-----------------------	--	---

NUMĂRUL ORELOR PE SAPTĂMÂNĂ				TOTAL ORE SEMESTRU	TOTAL ORE ACTIVITATE INDIVIDUALĂ *	NUMĂR DE CREDITE	TIPUL DE EVALUARE (P-pe parcurs, C-colocviu, E-examen, M-mixt)	LIMBA DE PREDARE
C	S	L	Pr.					
2		1		<b>56</b>	<b>80</b>	<b>5</b>	<b>E</b>	Română

TITULARUL DISCIPLINEI	GRADUL DIDACTIC ȘI ȘTIINȚIFIC, PRENUMELE, NUMELE	CATEDRA
	<b>PROF. DR. DAN FLORIN MIHAILESCU</b>	<b>DAFAB</b>

DISCIPLINE ANTERIOR ABSOLVITE	<b>Fiziologie, Biofizica</b>
-------------------------------	------------------------------

OBIECTIVE	Dobindirea cunostiintelor si abilitatilor avansate pentru rezolvare unor probleme din biologie cu ajutorul calculatorului
TEMATICĂ GENERALĂ	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Descoperiri cu ajutorul microscopiei computationale <b>2 ore</b></li> <li>2. Dinamica moleculara a functiei proteinelor <b>2 ore</b></li> <li>3. Agregarea proteinelor prin dinamica moleculara <b>2</b></li> <li>4. Lipide, bistraturi, micle, biomembrane <b>2 ore</b></li> <li>5. Fitarea datelor experimentale cu ajutorul modelarii moleculare (difracție de raze X, RMN, difuzie de neutronie, imprastiere de raze X, spectroscopie IR, spectroscopie de THz) <b>2 ore</b></li> <li>6. Calculul de energie libera in studii proteina-ligand <b>2 ore</b></li> <li>7. Simularea la nivel atomic a amestecurilor mixte de lipide <b>2</b></li> <li>8. Dinamica si energetia permeatie prin aquaporine. Simulari de dinamica molecular <b>2 ore</b></li> <li>9. Implicatii biologice ale simularilor moleculara in sistemelor analoage <b>2 ore</b></li> <li>10. Simularea membrane bacteriene <b>2 ore</b></li> <li>11. Simularea proteinelor din anvelopa virala <b>2 ore</b></li> <li>12. Modele teroretice si computationale ale canalelor ionice <b>2 ore</b></li> <li>13. Importanta hidratarii si dinamicii in selectivitatea canalelor ionice <b>2 ore</b></li> <li>14. Simularea moleculara a glucidelor si glicoproteinelor <b>2 ore</b></li> </ol>
TEMATICA LUCRĂRILOR PRACTICE	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Vizualizarea moleculara <b>4 ore</b></li> <li>2. Energie si minimizare <b>2 ore</b></li> <li>3. Minimizarea energiei si analiza <b>2 ore</b></li> <li>4. Analiza conformationala <b>2 ore</b></li> </ol>

	5. Simulari simple de dinamica moleculara in vid si in solutie <b>2 ore</b> 6. Dinamica moleculara si analiza <b>2 ore</b>
METODE DE PREDARE	Cursuri interactive. Ilustrari si animatii („PowerPoint”, „Smartboard”) Experimente virtuale. Prezentarea si discutarea litteraturii stiintifice (articole, referate).

BIBLIOGRAFIE OBLIGATORIE (SELECTIV)	1. Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Edition) , Andrew Leach, Prentice Hall; 2 edition, 2001 2. Bioinformatics for Dummies, J-M Claverie, C. Notredame, Wiley Publishing, Inc. Biophysics, 4th ed. , R. Glaser, Springer-Verlag, 2nd ed. 2007 3. Computational Biochemistry and Biophysics, M. Dekker, CRC Press, 2001
---	--

EVALUARE	condiții	Participarea la toate lucrarile practice si testul final (colocviu) Intocmirea la timp a referatelor de laborator
	criterii	Calitatea cunostiintelor teoretice si practice, progresul inregistrat de fiecare student
	forme	a) Testare la examen (evaluarea finala) b) Testarea periodica pe durata lucrarilor practice si evaluarea referatelor de laborator prin lucrari de control c) raspunsurile finale la lucrarile practice de laborator (colocviu) Facultativ: d) referate/comunicari sustinute oral/participari la conferinte stiintifice studentesti/proiecte de cercetare
	formula notei finale	$a \times 0.6 + (b+c) \times 0.4$ Se adauga un punct la nota finala daca este indeplina conditia d)

4 iulie 2010

**Prof. Dr. Dan Florin Mihailescu**