

FIȘA DISCIPLINEI

DENUMIREA DISCIPLINEI	Metode actuale in modelarea moleculara	COD:
-----------------------	---	------

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

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		56	80	5	E	Română

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

DISCIPLINE ANTERIOR ABSOLVITE	Fiziologie, Biofizica
-------------------------------	------------------------------

OBIECTIVE	Dobindirea cunostiintelor si abilitatilor avansate pentru rezolvare unor probleme din biologie cu ajutorul calculatorului
TEMATICĂ GENERALĂ	<ol style="list-style-type: none"> 1. <i>Design</i>-ul asistat de calculator al proteinelor functionale in interactiune cu alte proteine 2 ore 2. "Docking" 2 ore 3. Metode intensive de dinamica moleculara folosind calculatoare distribuite 2 ore 4. Metode QM/MM pentru estimarea parametrilor unei reactii biochimice 2 ore 5. Metode computationale pentru pliarea („folding”-ul) proteinelor 2 ore 6. Metode de bioninformatica de tip secventa proteica- structura proteica pentru modelare de tip "threading" 2 ore 7. Metode pentru modelarea membranelor celulare. Interactiunea lipid-proteina 2 ore 8. Metode aproximative de tip "coarse-grain"si "unified atom" 2 ore 9. Metoda de aproximari ale solventului "sarcini scalate"si Born generalizat 2 ore 10. Metode de tip Poisson-Boltzmann (PB) pentru evaluarea proprietatilor electrostatice ale sistemelor biomoleculare 2 ore 11. Metode de tip PB pentru calcul proprietatilor electrice ale unui canal ionic 2 ore 12. Modelarea implicita a solvataii nepolare in scopul simularii plierii proteinelor si tranzitiilor conformationale 2 ore 13. Modelarea moleculara a hidratarii in <i>drug design</i> 2 ore 14. Modelarea receptorilor cuplati cu protein G. Implicatii in <i>drug design</i> 2 ore
TEMATICĂ LUCRĂRILOR PRACTICE	<ol style="list-style-type: none"> 1. Baze de date de biomolecule, vizualizari 2 ore 2. Dinamica ligandului in sistem simplu proteina-ligand 2 ore 3. Analiza de moduri normale 2 ore 4. Calcule de energie libera 2 ore 5. Calea de reactie optima/minima 2 ore 6. Homology modelling 2 ore 7. Scripting python, biopython, perl, tcl 4 ore

	8. Metoda Posson-Boltzmann 2 ore
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