

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Biologie și Geologie
1.3 Departamentul	Departamentul de Biologie Moleculară și Biotehnologie
1.4 Domeniul de studii	Biologie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Bioinformatică aplicată în științele vieții

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei (ro) (en)	Bioinformatică structurală și modelare biomoleculară Structural bioinformatics and bio-molecular modelling				
2.2 Titularul activităților de curs	CS I Dr. <i>Habil.</i> Cojocaru Vlad				
2.3 Titularul activităților de seminar	CS I Dr. <i>Habil.</i> Cojocaru Vlad				
2.4 Anul de studiu	1	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E
				2.7 Regimul disciplinei	Obligatorie
2.8 Codul disciplinei	BME1122				

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					24
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					8
Examinări					4
Alte activități:					-
3.7 Total ore studiu individual	70				
3.8 Total ore pe semestru	126				
3.9 Numărul de credite	5				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> Genetică, Biochimie și biofizică moleculară, Biologie celulară și moleculară
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Abilități de utilizare a calculatorului

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Videoproiector Platformă de comunicare online
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Participarea la 100% dintre activitățile de seminar/ laborator. Calculatoare, medii specifice de dezvoltare și implementare

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Dezvoltarea capacității de a explica procese biologice fundamentale (replicarea, transcrierea, cataliza enzimatică) ca o consecință a interacțiunilor biomacromoleculare într-un anumit context al vieții celulare; • Abilitatea de utilizare a unor baze de date, instrumente de predicție, analiză și vizualizare bioinformatică în scopul deslușirii structurii și funcțiilor biomacromoleculilor. • Dezvoltarea capacității de analiză, sinteză și comunicare a informației științifice de specialitate.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Inșușirea informațiilor necesare/complementare asimilării conținutului disciplinelor de Proteomică, Transcriptomică, Metabolomică, Genomică aplicată în sănătatea umană, Proiect individual de bioinformatică. • Derularea unui proiect de cercetare cu tot ce implica aceasta de la utilizarea conceptelor specifice, selectarea și aplicarea metodelor de studiu, interpretarea datelor, până la comunicarea rezultatelor.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Descrierea relației dintre secvența, structura, dinamica și funcția biomacromoleculilor de tipul acizilor nucleici și proteinelor, precum și a produșilor lor de interacțiune, cu ajutorul bazelor de date și metodelor de predicție, analiză și vizualizare dedicate.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Înțelegerea relației dintre secvența nucleotidică și secvența de aminoacizi, precum și dintre secvența, structura și funcțiile proteinelor; • Explicarea modului în care particularitățile de structură determină funcția la nivelul unor procese biologice; • Aplicarea instrumentelor bioinformatică pentru alinierea secvențelor în scopul descoperirii motivelor și domeniilor proteinelor și a clasificării acestora; • Utilizarea principalelor strategii computaționale pentru predicția, modelarea, simularea, analiza, și vizualizarea structurilor proteinelor, acizilor nucleici și a produșilor lor de interacțiune.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Introducere în bioinformatica structurală: definiție, scopuri și aplicații.	Expunerea interactivă Prezentarea Explicarea Exemple practice Discuții pe studii de caz	
Relația dintre secvență, structură și funcție la acizi nucleici și proteine.		
Alinierea secvențelor. Baze de date utilizate în bioinformatica structurală.		
Clasificarea proteinelor și baze de date dedicate.		
Structuri macromoleculare: nivele de organizare a structurilor, generarea experimentală, vizualizarea și modelarea structurilor 3D pe baza datelor de secvență.		
Strategii de analiză a structurilor 3D. Predicția structurilor secundare și terțiare și a funcțiilor biomacromoleculilor.		

Fundamentele structurale ale dinamicii macromoleculare, specificității de legare și catalizei enzimatic.		
Bioinformatica structurală în biologia sistemelor și în aplicații clinice.		

Bibliografie

- Eidhammer I., Jonassen I., Taylor W.R., Protein bioinformatics : an algorithmic approach to sequence and structure analysis. Chichester : John Wiley & Sons, 2004
- Rigden D.J. From Protein Structure to Function with Bioinformatics : Springer; 2017
- Keith J.M., Bioinformatics. Vol. 2: Structure, function, and applications. New York : Humana Press, 2017.. In: Bioinformatics, vol. Vol. 2,
- Gaspari Z., Structural Bioinformatics, Springer, 2020
- Leach, A.R. Molecular modelling: principles and applications. 2nd edition, Pearson education.2001.
- Stryer L., Biochemistry. New York : W. H. Freeman and Company, 1995\
- Schlick T., Molecular modeling and simulation : an interdisciplinary guide. New York, Springer, 2010.
- Xiong J., Essential bioinformatics. New York : Cambridge University Press, 2006
- Ramachandran, K. I., Gopakumar, Deepa., Computational Chemistry and Molecular Modeling : Principles and Applications. Berlin, Springer-Verlag, 2008
- Chatenay, D., Multiple aspects of DNA and RNA : from biophysics to bioinformatics /. Amsterdam ; Elsevier, 2005.. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/book/9780444520814>.

Titlurile (1-3, 5, 6, 8,9,10) sunt disponibile în formă printată la bibliotecile Facultății de Biologie și Geologie. Titlurile (2, 4, 7) vor fi puse la dispoziția studenților de către titular. Titlul (7) este disponibil sub forma printată la biblioteca Facultății de Chimie și Inginerie Chimică.

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
Colectarea de date, analiza și vizualizarea: exerciții.	<ul style="list-style-type: none"> • Expunerea interactivă • Explicarea • Conversația • Studiu de caz • Demonstrația practică 	
Modelarea structurilor tridimensionale a biomacromoleculilor: studii de caz și exerciții		
Compararea structurilor 3D		
Modelarea și vizualizarea dinamicii moleculare		
Validarea, integrarea și compararea datelor		
Evaluare finală a unui proiect individual de bioinformatică structurală	<ul style="list-style-type: none"> • Evaluarea 	

Bibliografie

- Resurse electronice, baze de date și instrumente bioinformatică disponibile online.
Uniprot (SwissProt, <https://www.uniprot.org/>), Protein Data Bank (<https://www.rcsb.org/>), SCOP data base (<https://scop.mrc-lmb.cam.ac.uk/>), CATH data base (<https://www.cathdb.info/>), AlphaFold data base (<https://alphafold.ebi.ac.uk/>)
- Software
SwissModel (<https://swissmodel.expasy.org/>), Modeller (<https://salilab.org/modeller/>), Pymol (<https://pymol.org>), Visual Molecular Dynamics (<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>), Chimera (<https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>), AMBER (<http://ambermd.org/>), NAMD (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>), Gromacs (<https://www.gromacs.org/>), HADDOCK (<https://wenmr.science.uu.nl/haddock2.4/>), AUTODOCK (<https://autodock.scripps.edu/>), ROSETTA, (<https://www.rosettacommons.org/software>), AlphaFold (<https://www.deepmind.com/research/highlighted-research/alphafold>),

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

- Cursul permite achiziția unor competențe teoretice și practice necesare pentru o muncă de echipă în domeniul de cercetare-dezvoltare din entități academice, dar și în unități R&D din companii private.
- Cursul este prezent în curricula specializărilor similare la Universități din țară și străinătate.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.1 Curs	Cunoașterea conceptelor și metodelor din tematica cursului	Examen scris (test combinat)	50%
10.2 Seminar/laborator	Proiect individual de bioinformatică structurală / Prezentare articol științific	Colocviu oral	50%
10.3 Standard minim de performanță			
Fiecare student trebuie să obțină minim 5 la examenul scris și colocviul oral. Pentru a obține nota minimă 5 studentul trebuie să demonstreze însușirea conceptelor de bază din tematica cursului și lucrărilor practice.			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

28.01.2023

CS I Dr. *Habil.* Cojocaru Vlad

CS I Dr. *Habil.* Cojocaru Vlad

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

08.02.2023

Conf. dr. Beatrice Kelemen