

FIȘA DISCIPLINEI

Bioinformatică structurală și modelare biomoleculară

Anul universitar 2025-2026

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 studii / Calificarea	Bioinformatică
1.7. Forma de învățământ	Cu frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei		Bioinformatică structurală și modelare biomoleculară				Codul disciplinei	BME1122
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. Semestru	2	2.6. Tipul de evaluare	E/	2.7. Regimul disciplinei	Obligatorie

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/ proiect	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 pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					70 ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					24
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat (consiliere profesională)					8
Examinări					4
Alte activități					-
3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)				70	
3.8. Total ore pe semestru				126	
3.9. Numărul de credite				5	

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	Biochimie Moleculară și Biofizică, Biologie Moleculară și Celulară
4.2. de competențe	Cunoștințe computer de nivel mediu

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	Sala cu proiector, Platforma online
--------------------------------	-------------------------------------

5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	Laptop, prezenta obligatorie la toate sedintele de seminar
---	--

6.1. Competențele specifice acumulate¹

Competențe profesionale/esențiale	- Dezvoltarea capacității de a explica procese biologice fundamentale (replicare, transcriere, cataliză enzimatică) ca urmare a interacțiunilor biomacromoleculare într-un anumit context al vieții celulare; - Abilitatea de a utiliza baze de date bioinformatic, instrumente de predicție, analiză și vizualizare pentru a obține o înțelegere aprofundată a structurii și funcțiilor biomacromoleculor; - Dezvoltarea capacității de analiză, sinteză și comunicare a informațiilor științifice de specialitate
Competențe transversale	- Dobândirea informațiilor necesare/complementare asimilării conținutului disciplinelor Proteomică. Transcriptomica, Metabolomica, Genomica aplicata în sanatatea umana, Proiect individual de bioinformatica. - Realizarea unui proiect de cercetare cu tot ceea ce presupune de la utilizarea conceptelor specifice, selectarea si aplicarea metodelor de studiu, interpretarea datelor, pana la comunicarea rezultatelor.

6.2. Rezultatele învățării

Cunoștințe	Studentul cunoaște: - Caracterizarea structurală a biomoleculelor și complexelor biomoleculare - Descrierea teoretică a principalelor metode utilizate în Bioinformatica Structurală (Modelare structurală, Simulari de dinamică moleculară, andocare moleculară) - Mecanisme de reglare a genelor și legătura dintre structura și funcția biomoleculelor
Aptitudini	Studentul este capabil să - Vizualizeze structurile biomoleculelor și subliniați diverse proprietăți structurale - Efectueze modelarea structurală folosind o serie de metode disponibile - Configureze și efectueze simulări de dinamică moleculară - Configureze și efectueze Molecular Docking - Navigheze în sistemul de operare Linux - Scrie scripturi în diferite limbaje de programare pentru a vizualiza și analiza datele

¹ Se poate opta pentru competențe sau pentru rezultatele învățării, respectiv pentru ambele. În cazul în care se alege o singură variantă, se va șterge tabelul aferent celeilalte opțiuni, iar opțiunea păstrată va fi numerotată cu 6.

Responsabilități și autonomie	Studentul are capacitatea de a lucra independent pentru • Derularea unui proiect de cercetare la scară mică • Scrierea un raport științific despre un proiect de cercetare conform unui șablon de jurnal predefinit • Prezentarea unui articol științific colegilor
--------------------------------------	--

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	• Descrierea relației dintre secvența, structura, dinamica și funcția biomacromoleculelor 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	• 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 ă 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 biomacromoleculelor.		
Fundamentele structurale ale dinamicii macromoleculare, specificității de legare și catalizei enzimatică.		
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.	Expunerea interactivă Explicarea Conversația Studiu de caz Demonstrația practică	
Modelarea structurilor tridimensionale a biomacromoleculelor: 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		

Bibliografie

1. 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/>)

2. 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
10.4 Curs	Cunoașterea conceptelor și metodelor predate	Examen scris (grila cu 0 sau mai multe răspunsuri corecte)	30%
10.5 Seminar/laborator	Evaluarea proiectului de cercetare	Raport scris (2 pagini) folosind un template al unei reviste de prestigiu	30%
	Evaluarea aptitudinilor de prezentare	Prezentarea unui articol științific cu tema apropiată de temele și metodele predate la curs	30%
10.6 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.			

11. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)²

Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă								
								

² Păstrați doar etichetele care, în conformitate cu [Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic](#), se potrivesc disciplinei și ștergeți-le pe celelalte, inclusiv eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă - dacă nu se aplică. Dacă nicio etichetă nu descrie disciplina, ștergeți-le pe toate și scrieți "Nu se aplică".

--	--	--	--	--	--	--	--	--

Data completării:

21.01.2025

Semnătura titularului de curs

Cojocaru Vlad, PhD Habil., CS I

Semnătura titularului de seminar

Cojocaru Vlad, PhD Habil., CS I

Data avizării în departament:

...

Semnătura directorului de departament

..Conf. dr. Beatrice Kelemen