



Universitatea de Vest din Timișoara
Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie

Departamentul de Chimie

Laboratorul de Chimie Fizică Structurală și Computațională

DISCIPLINA MASTER AN I: CHIMIE COMPUTAȚIONALĂ ȘI INTERACȚII SPECIFICE

Titular Curs: Conf. Univ. Dr. Mihai V. Putz

SUBIECTE EXAMEN

Subiectul 1

Argumentați analitic de ce ecuația Michaelis–Menten *nu poate fi rezolvată exact* pentru concentrația de substrat $[S](t)$.

Subiectul 2

Formulați soluția W–Lambert a ecuației Michaelis–Menten temporale.

Subiectul 3

Interpretați probabilistic reacția enzimatică:



Subiectul 4

Explicitați legătura dintre forma logistică și cea clasică a probabilității de reacție a unei reacții enzimatică după mecanismul Michaelis–Menten?

Subiectul 5

Formulați soluția logistică a concentrației de substrat $[S](t)$ în manieră directă, pornind de la soluția implicită W–Lambert a reacției Michaelis–Menten.

Subiectul 6

Demonstrați superioritatea formalismului logistic în cinetica enzimatică, față de abordarea clasică Michaelis–Menten, relativ la condiția de stare de tranziție cuasi-staționară a complexului $[ES]$.

Subiectul 7

Formulați activitatea biologică a substratului în interacțiile de tip ligand-receptor pe baza analogiei reacțiilor enzimă-substrat.

Subiectul 8

Scrieți și comentați 2 definiții alternative pentru dispersia statistică.

Subiectul 9

Scrieți expresia coeficientului de corelare în funcție de covarianță și varianță; particularizați expresia în cazul distribuției uniforme.

Subiectul 10

Scrieți și comentați ecuația de corelare $y=y(x)$ în cel puțin 2 forme distincte dar echivalente.

Subiectul 11

Scrieți coeficientul de corelare sub forma activitate dependentă-variabilă independentă și sub forma activitate observată-activitate calculată și comentați diferența.

Subiectul 12

Ce înțelegeți prin probabilitate condiționată? Exemplificați utilizarea probabilității condiționate în cazul corelării monolineare $y=y(x)$.

Subiectul 13

Demonstrați pentru coeficientul de corelare inegalitatea:

$$| R_{xy} | \geq 1$$

Subiectul 14

Exprimați soluția ecuației matriceale multilinare

$$Y=a+bX$$

în sensul minimizării erorilor.

Subiectul 15

Formulați principiul metodei de corelare Spectral-SAR.

Subiectul 16

Formulați relația generală dintre vectorul $|x_k\rangle$ din spațiul real și vectorul $|\Omega_k\rangle$ din spațiul ortogonal pe mulțimea datelor.

Subiectul 17

Formulați și dezvoltați determinantul Spectral-SAR în cazul regresiei bi-lineare:

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2$$

Subiectul 18

Definiți, comentați și interpretați factorul de corelare algebric și comparați-l cu cel standard statistic.

Subiectul 19

Formulați o expresie analitică pentru determinarea activității biologice temporale a interacției ligand-receptor, folosind termenii formalismului Spectral-SAR; particularizați pentru indicatorul EC₅₀.

Subiectul 20

Ce înțelegeți prin *drum spectral* în modelarea activității biologice? Dar prin *principiul acțiunii spectrale minime* relativ la modelarea Spectral-SAR sau/și QSAR?

Subiectul 21

Cum poate fi extins formalismul QSAR la varianta Quantum-SAR? Exemplificați din perspectiva indicatorului EC₅₀.

Subiectul 22

Ce înțelegeți prin “paradoxul enzimatic”? Cum poate fi soluționat? Ce implicații are la nivelul factorilor de corelare statistic și algebric în modelarea activității biologice ligand-receptor?

Bibliografie

1. **Putz M.V.**, Putz A.M., Chiriac A., Vlad-Oros B. "*Elemente de Cinetică Chimică Omogenă, Enzimatică Clasică și Logistică*", Editura Mirton, Timișoara (2008), pag. 300; ISBN: 978-973-52-0469-3.
2. **Putz M.V.**, Lacrămă A.-M., Ostafe V. "Introducing logistic enzyme kinetics", *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 9 (9) (2007) 2910–2916 ♣ URL: <http://inoe.inoe.ro/joam> ♣ Articol premiat de Consiliul Național al Cercetării Științifice din Învățământul Superior (CNCSIS-107-2007/nr. 132/Septembrie 2) în programul PN-II-RU-PREC_{ISI}-2007-1.
3. **Putz M.V.**, Lacrămă A.-M. "Enzymatic control of the bio-inspired nanomaterials at the spectroscopic level", *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 9 (8) (2007) 2529 – 2534. ♣ URL: <http://inoe.inoe.ro/joam> ♣ Articol premiat de Consiliul Național al Cercetării Științifice din Învățământul Superior (CNCSIS-109-2007/nr.133/Septembrie 2) în programul PN-II-RU-PREC_{ISI}-2007-1.
4. **Putz M.V.**, Lacrămă A.-M., Ostafe V. "Full Analytic Progress Curves of the Enzymic Reactions in Vitro", *International Journal of Molecular Sciences*, 7(11) (2006) 469-484 ♣ URL: <http://www.mdpi.com/1422-0067/7/11/469>
5. **Putz M.V.** "A Spectral Approach of the Molecular Structure – Biological Activity Relationship Part I. The General Algorithm", *Annals of West University of Timișoara, Series of Chemistry*, 15(2) (2006) 159-166 ♣ URL: http://www.cbg.uvt.ro/awut_sc/awut/12006.php
6. **Putz M.V.**, Lacrămă A.-M. "A Spectral Approach of the Molecular Structure – Biological Activity Relationship Part II. The Enzymatic Activity", *Annals of West University of Timișoara, Series of Chemistry*, 15(2) (2006) 167-176. ♣ URL: http://www.cbg.uvt.ro/awut_sc/awut/12006.php
7. **Putz M.V.**, Lacrămă A.-M. "Introducing Spectral Structure Activity Relationship (S-SAR) Analysis. Application to Ecotoxicology", *International Journal of Molecular Sciences*, 8(5) (2007) 363-391 ♣ URL: <http://www.mdpi.com/1422-0067/8/5/363>
8. **Putz M.V.**, Putz A.M., Lazea M., Ienciu L., Chiriac A. "Quantum-SAR Extension of the Spectral-SAR Algorithm. Application to Polyphenolic Anticancer Bioactivity", *International Journal of Molecular Sciences*, 10(3) (2009) 1193-1214 ♣ URL: <http://www.mdpi.com/1422-0067/10/3/1193> (/pdf)
9. **Putz M.V.** Prelegeri Master: <http://www.mvputz.iqstorm.ro/d2.php>