

FIȘA DISCIPLINEI
Ciclul III, DOCTORAT

Domeniul studii de doctorat		053.3. Științe fizice			
Programul de doctorat/ specialitatea		Fizica statistică și cinetică (131.03)			
Codul și Denumirea disciplinei		S.02.O.6 Tehnici și instrumente de cercetare științifică în domeniul fizicii statistice și cinetice			
Titularul disciplinei		Nicolae ENACHI, dr .hab. în șt.fizico-matematice., prof. univ.			
Numărul de ore					
Total	Prelegeri	Seminare	Lucrul individual	Nr. de credite	Forma de evaluare
180	4	6	170	6	Examen
Funda- mentare	<p>Scopul cursului este de a identifica metode de cercetare pentru procesarea bioinformației pe măsură ce se propagă prin țesutul neuronal biomolecular al organismelor vii. O metodă clasică implică utilizarea aproximării Born-Oppenheimer (BO) pentru sistemele biomoleculare aflate în dezechilibru sub acțiunea unui câmp electromagnetic. Aceasta presupune că funcțiile de undă ale nucleelor atomice și ale electronilor dintr-o moleculă pot fi tratate separat conform unei metode adiabatică, utilizând raportul de masă ca un parametru mic. Acest parametru mic este utilizat și în cinetică ca parametru pentru a descrie ierarhia timpilor de relaxare abordați atât de BO, cât și de Hakken în cursul sinergismului.</p> <p>A doua metodă importantă este legată de aspectul statistic al informației biosistemelor interactive, propusă de Cl. Shannon și dezvoltată sub aspectul Informației Mutuale între subsisteme. Intuitiv, informația mutuală măsoară informația pe care X și Y o împărtășesc: măsoară cât de multă cunoaștere a uneia dintre aceste variabile reduce incertitudinea cu privire la cealaltă. Aspectul aplicat în bioinformatică este evident în cazul transmiterii și citirii acestei informații biomoleculare, care este o modalitate de măsurare a cantității de informație pe care o poartă o variabilă aleatorie observabilă X despre un parametru necunoscut θ al unei distribuții care modifică X. Metodele i se acordă o atenție deosebită. Legătura Cramér-Rao afirmă că inversa informației Fisher este o limită inferioară a varianței oricărui estimator imparțial al lui θ. Aceasta conduce direct la principiul incertitudinii din Fizica Cuantică și deschide noi posibilități pentru utilizarea entropiei Shannon, a Informației Mutuale, a Informației Fisher atât în sisteme cuantificate, cât și în bioinformatică.</p> <p>Instrumentele cuantice se bazează pe o metodă de măsurare indirectă, în care biosistemul molecular în interacțiune cu laserul format prin impulsuri electromagnetice scurte suferă modificări. Aici, o mulțime de măsurători indirecte, spectrul de absorbție/emisie; studiul coloniilor la microscop; studiul evoluției microorganismelor în timp sunt corelate cu radiația pulsată aplicată anterior. Dinamica sistemelor deschise sub acțiunea laserului este descrisă de ecuația de bază pentru matricea densității. Acestea se reduc la ecuații Fokker-Plank sau de difuzie, în care ecuația de mișcare pentru informația studiată este redusă la metoda de calcul a lui Kiyosi Itô, care extinde metodele de calcul la procese stocastice precum mișcarea browniană în alte domenii cu aplicații în microbiologie, statistica economică, statistica cuantică etc.</p>				
Conținutul disciplinei	<ol style="list-style-type: none"> 1. Ecuația Neyman pentru operatorul statistic , legătura lui ci funcia de unda din mecanica cuantica; 2. Efecte dinamice și statice la interacțiunea luminii ultraviolete cu lungimi de undă de 254 și 354 nm asupra fungilor/bactericidelor. 3. Utilizarea modelelor Born-Oppenheimer (BO) și Davydov-Kasha în explicații în efectele dinamice/statice. 4. Studiul teoriei informației propuse de Shannon cu ajutorul entropiei, stocarea și transmiterea unui anumit tip de informație definită matematic. 5. Conceptul central al integralei stocastice Itô - o generalizare stocastică a integralei Riemann-Stieltjes în analiză. 6. Denaturarea ADN-ului indusă de fotoni UVC: o posibilă cale disipativă către replicarea fără enzime; Aspectul microscopic al legaturilor covalente, Ionice și de Hidrogen în construcția ADN/ARN și a proteinelor. 7. Aplicarea informației Fisher în evidentierea scorului or succesului unei procesari. 8. Habitatul vieții timpurii: raze X solare și radiații UV la suprafața Pământului în urmă cu 4-3,5 miliarde de ani. 9. Inactivarea cu ultraviolete C a dermatofitelor: implicații pentru tratamentul onicomicozei; 				

Competențele obținute/ Rezultatele învățării	<p>CP 1. Cunoașterea distribuțiilor Gibbs și prelucrarea statistica clasica și statistica cuantica. Distribuția Bose-Einstein, distribuția Fermi-Dirac.</p> <p>CP 2. Distingerea aspectului microscopic al legăturilor covalente, Ionice și de Hidrogen în construcția ADN/ARN și a proteinelor.</p> <p>CP 3. Utilizarea ecuației Neyman pentru operatorul statistic , legătura lui cu funcția de undă din mecanica cuantica;</p> <p>CP 4. Descrierea trecerii sistemelor moleculare în stări mixate. Comportamentul corelat la distanța a informației cuantice. Teleportare cuantica, inseparabilitate.</p> <p>CP 5. Explicarea amănunțit a luminii neclasice de către sistemele biologice de pe pozițiile metodelor fizicii cuantice.</p>
Bibliografia selectivă/ minimală	<ol style="list-style-type: none"> 1. Schneider, Thomas D. (2006). "<u>Claude Shannon: Biologist</u>". <i>IEEE Engineering in Medicine and Biology Magazine</i>. 25 (1): 30–33. doi:10.1109/memb.2006.1578661. ISSN 0739-5175. PMC 1538977. PMID 16485389. 2. Welch L, Lewitter F, Schwartz R (2014). "<u>Bioinformatics Curriculum Guidelines: Toward a Definition of Core Competencies</u>". <i>PLOS Comput Biol</i>. 10 (3): e1003496. Bibcode:2014PLSCB..10E3496W. doi:10.1371/journal.pcbi.1003496. PMC 3945096. PMID 24603430. 3. Katarzyna Nałęcz-Charkiewicz, Kamil Charkiewicz, Robert M Nowak, Quantum computing in bioinformatics: a systematic review mapping, <i>Briefings in Bioinformatics</i>, Volume 25, Issue 5, September 2024, bbae391, https://doi.org/10.1093/bib/bbae391 4. M. Kasha , H. R. Rawls and M. Ashraf El-Bayoumi . The exciton model in molecular spectroscopy, <i>Pure and Applied Chemistry</i>, https://doi.org/10.1351/pac196511030371. 5. Nielsen, Frank (2023). "<u>A Simple Approximation Method for the Fisher–Rao Distance between Multivariate Normal Distributions</u>". <i>Entropy</i>. 25 (4): 654. arXiv:2302.08175. Bibcode:2023Entrp..25..654N. doi:10.3390/e25040654. PMC 10137715. PMID 37190442. 6. Pavliotis, Grigorios A. (2014). <i>Stochastic Processes and Applications: Diffusion Processes, the Fokker-Planck and Langevin Equations</i>. Springer. pp. 38–40. doi:10.1007/978-1-4939-1323-7_2. ISBN . 7. Vedral, Vlatko (2006). <i>Introduction to Quantum Information Science</i>. Oxford: Oxford University Press. doi:10.1093/acprof:oso/9780199215706.001.0001. ISBN . OCLC 822959053. 8. B. Ozcelik, Fungi/Bactericidal and Static Effects of Ultraviolet Light in 254 and 354 nm Wavelengths, Fungi/Bactericidal and Static Effects of Ultraviolet Light in 254 and 354 nm Wavelengths, <i>Research Journal of Microbiology</i>, 2 (2007) 42-49. DOI: 10.3923/jm.2007.42.49 9. N.A. Enaki, E. Starodub, T. Paslari, M. Turcan and S. Bazgan, Increasing of Decontamination Rate of Infected Fluid by Rotation Channels under the Dispersion of Ultraviolet C Radiation by Composite Metamaterial, <i>Phys Sci & Biophys J</i>. 5(2) (2021), DOI: 10.23880/psbj-16000188 10. N. A. Enaki, Monograph: Non-linear Cooperative Effects in Open Quantum Systems: Entanglement and Second Order Coherence, Nova Science Publishers, 2015, NY, 355 pp. 11. K. Michaelian, N. S. Padilla, UVC photon-induced denaturing of DNA: A possible dissipative route to Archean enzyme-less replication, <i>Heliyon</i> 5 (2019) e01902, https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e01902 12. Crossen, J. Sanz-Forcada, F. Favata, O. Witasse, T. Zegers, and N. F. Arnold, Habitat of early life: Solar X-ray and UV radiation at Earth's surface 4–3.5 billion years ago, <i>J. of Geological Research</i>, 112 (2007), E02008, doi:10.1029/2006JE002784