

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Tehnici moderne de sinteza in chimie

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Elemente de modelare moleculară <b>CMM6634</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt Kun						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt Kun						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Ob.

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					40
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					35
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat					9
Examinări					2
Alte activități: .....					-
3.7 Total ore studiu individual	106				
3.8 Total ore pe semestru	150				
3.9 Numărul de credite	5				

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> <li>Nu este cazul</li> </ul>
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> <li>Nu este cazul</li> </ul>

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>Nu va fi acceptată întârzierea</li> <li>Studentii vor primi copii ale foilor de tip Powerpoint cu materialul de curs în format electronic după fiecare ședință de curs</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise</li> <li>Studentii trebuie sa participe la seminar. Rezolvarea temelor pe parcursul semestrului este obligatorie.</li> </ul>

### 6. Competențele specifice acumulate

competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>C1. Caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</b></li> <li>• C1.1. Identificarea metodelor adecvate și specifice pentru caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• C1.2. Stabilirea modalităților de atribuire a structurii și corelarea informației oferite de diverse metode</li> <li>• C1.3. Utilizarea corectă și adecvată a metodelor specifice de caracterizare structurală a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• C1.4. Analiza critică a metodelor de caracterizare structurală a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• C1.5. Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatura pentru caracterizarea structurală completă a unui reprezentant din clasele de compuși studiate</li> <li>• <b>C2. Studiul relației structură –proprietăți în design-ul, obținerea și caracterizarea unor materiale cu diverse aplicații</b></li> <li>• C2.1. Descrierea și utilizarea de concepte, teorii și metode avansate în identificarea particularităților structurale care conferă unor compuși potențial aplicativ</li> <li>• C2.2. Stabilirea modalităților teoretice și experimentale de corelare structură-proprietăți</li> <li>• C2.3. Utilizarea relației structură-proprietăți în determinarea potențialului aplicativ a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• C2.4. Analiza critică a diverselor abordări teoretice și experimentale în determinarea proprietăților care recomandă un compus/o clasă de compuși pentru utilizarea ca material</li> <li>• C2.5. Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatură pentru identificarea relației dintre structură și proprietăți și caracterizarea unui reprezentant cu potențial aplicativ din clasele de compuși studiate</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit</li> <li>• Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li> <li>• Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate</li> <li>• Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.</li> </ul>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Familiarizarea studenților cu noțiuni de bază și avansate, concepte, teorii și modele de bază din domeniul modelării moleculare</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Îmbogățirea cunoștințelor de chimie structurală, prin adăugarea de noi cunoștințe, noi explicații la bagajul deja existent; îmbogățirea limbajului chimic. Utilizarea corectă a noțiunilor de chimie.</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor pentru îmbunătățirea performanțelor proceselor chimice utilizând instrumente asistate de calculator</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor pentru dezvoltarea și utilizarea chimiei cuantice în studiul structurilor moleculare și a proceselor chimice</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor pentru determinarea și interpretarea proprietăților structurale ale compușilor chimici cu ajutorul modelării moleculare.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
1. Introducere în modelarea moleculară, definirea domeniului, relația cu celelalte ramuri ale chimiei	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Suprafețe de potențial	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Mecanica moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Bazele teoriei orbitalilor moleculari. Seturi de baza	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5-6. Metode MO ab initio, HF și post-HF	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea;	

	Problematizarea	
7. Metode MO semiempirice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Teoria funcționalelor de densitate (DFT).	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
9. Metode hibride QM/MM	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Metode de dinamică moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Calculul proprietăților sistemelor moleculare	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Calculul proprietăților sistemelor moleculare: Determinarea distribuției de sarcină, potențiale moleculare electrostatice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Calculul stărilor excitate	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Determinarea mecanismelor de reacție prin calculul stărilor de tranziție	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>Bibliografie</b> 1. C. J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models, Wiley, 2004. 2. E. Lewars, Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Kluwer Academic Publishers, 2003 3. I. Silaghi-Dumitrescu, D. Horvath, Mecanică Moleculară, Presa Universitară Cluj-Napoca, 1996. 4. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999. 5. Gy.Tasi Számítógépes kémia, JATEPress Szeged, 2010 6. Mueller M.R. Fundamentals of Quantum Chemistry.. Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computations Kluwer Academic Publishers, 2001		
<b>8.2 Seminar / Laborator</b>	Metode de predare	Observații
1. Prezentarea lucrărilor, cerințe, mod de întocmire a referatelor. Noțiuni recapitulative.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Construirea de modele moleculare pe calculator	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul mecanicii moleculare	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor ab initio și semiempirice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5-6. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
7-8. Construirea modelelor implicând mai mult decât o moleculă; sisteme supramoleculare, nanosisteme	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
9-10. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular și supramolecular	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11-12. Modelarea formei și energiei sistemelor supramoleculare și a nanosistemelor	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Tehnici dinamice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Evaluare	Test	
<b>Bibliografie</b> 1. W. J. Hehre, A. J. Shusterman, W. W. Huang, A laboratory Book of Computational Organic Chemistry, Wavefunction, Irvine, California, 1996. 2. Spartan '06. Tutorial and User Guide, Wavefunction, 2005. 3. Referate de laborator		

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

Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina Modelare și design

molecular studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS.

#### 10. Evaluare

10. Evaluare			
Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – înțelegerea și aplicarea corectă a problematicei tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este condiționat de rezolvarea temelor de seminar Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	50%
	Rezolvarea corectă a exercițiilor si problemelor.		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar.	Temele de seminar se predau la datele stabilite de comun acord cu studenții. Notarea se face pe baza raportului scris și a datelor din fișiere anexe solicitate pentru activitățile de modelare	50%
	Rezolvarea corecta a temelor pe parcursul semestrului.		
	Rezolvarea sarcinilor practice		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>Nota 5 (cinci) la examen conform baremului.</li></ul>			

Data completării  
9.04.2020

Semnătura titularului de curs  
Lector Dr. ing. KUN Attila-Zsolt



Semnătura titularului de seminar  
Lector Dr. ing. KUN Attila-Zsolt



Data avizării în departament  
9.04.2020

Semnătura directorului de departament  
prof.dr.ing.Paizs Csaba

