

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 |
| 1.4 Domeniul de studii | Chimie |
| 1.5 Ciclul de studii | Master |
| 1.6 Programul de studiu / Calificarea | CHIMIE AVANSATĂ / master in chimie |

2. Date despre disciplină

| | | | | | | | |
|--|---|---------------|---|------------------------|----|-------------------------|-----------------|
| 2.1 Denumirea disciplinei | Structura și dinamica moleculară CMR6532 | | | | | | |
| 2.2 Titularul activităților de curs | Conf. dr. Gabriela Nemeș | | | | | | |
| 2.3 Titularul activităților de seminar | Conf. dr. Gabriela Nemeș | | | | | | |
| 2.4 Anul de studiu | II | 2.5 Semestrul | 3 | 2.6. Tipul de evaluare | VP | 2.7 Regimul disciplinei | DS ^a |

^a DS = disciplină de specialitate

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 | | | | | 20 |
| Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren | | | | | 20 |
| Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri | | | | | 35 |
| Tutoriat | | | | | 4 |
| Examinări | | | | | 4 |
| Alte activități: | | | | | - |
| 3.7 Total ore studiu individual | 83 | | | | |
| 3.8 Total ore pe semestru | 125 | | | | |
| 3.9 Numărul de credite | 5 | | | | |

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

| | |
|-------------------|--|
| 4.1 de curriculum | <input type="checkbox"/> Nu este cazul |
| 4.2 de competențe | <input type="checkbox"/> Nu este cazul |

5. Condiții (acolo unde este cazul)

| | |
|--|---|
| 5.1 De desfășurare a cursului | <input type="checkbox"/> Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile în modul silențios sau închise <input type="checkbox"/> Studenții vor primi copii ale foilor de tip Powerpoint cu materialul de curs în format tipărit înainte de fiecare ședință de curs |
| 5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului | <input type="checkbox"/> Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile în modul silențios sau închise |

| | |
|--|--|
| | <input type="checkbox"/> Predarea referatului și rezultatelor de laborator se va face în format electronic și condiționează notarea la această materie |
|--|--|

6. Competențele specifice acumulate

| | |
|--------------------------------|--|
| Competențe profesionale | <input type="checkbox"/> Caracterizarea structurala complexa compusi anorganici, bioanorganici, organici, organometalici si supramoleculari <input type="checkbox"/> Studiul relatiei structura –proprietati in design-ul, obtinerea si caracterizarea unor materiale cu diverse aplicatii |
| Competențe transversale | <input type="checkbox"/> Executarea cu independență a sarcinilor profesionale complexe și desfășurarea autonomă de activități de cercetare-proiectare, utilizând tehnici asistate de calculator și respectând normele de etică profesională și de conduită morală <input type="checkbox"/> Planificarea, monitorizarea și asumarea sarcinilor profesionale ale unui grup profesional subordonat. Demonstrarea capacității de coordonare a activității, gândire analitică, adaptabilitate și flexibilitate, colaborare cu membrii echipei <input type="checkbox"/> Autoevaluarea performanțelor profesionale proprii și stabilirea nevoilor de formare continuă, informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate și domenii conexe, în corelație cu nevoile pieței muncii |

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

| | |
|---------------------------------------|--|
| 7.1 Obiectivul general al disciplinei | <input type="checkbox"/> Familiarizarea studenților cu noțiuni de bază și avansate, concepte, teorii și modele de bază din domeniul structurii și dinamici moleculare |
| 7.2 Obiectivele specifice | <input type="checkbox"/> Dobândirea cunoștințelor necesare studiului sistemelor moleculare utilizând instrumente asistate de calculator <input type="checkbox"/> Dobândirea cunoștințelor pentru utilizarea modelelor cuantice în caracterizarea sistemelor moleculare și supramoleculare |

8. Conținuturi

| 8.1 Curs | Metode de predare | Observații |
|--|---|------------|
| 8.1.1.Introducere in modelarea moleculara, definirea domeniului, relatia cu celelalte ramuri ale chimiei. Teoria orbitalilor moleculari: concepte de bază, diagrame de orbitali moleculari | Prelegerea Explicația Conversația | |
| 8.1.2.Grupuri punctuale. Simetria orbitalilor. Diagrame de orbitali moleculari. | Prelegerea Explicația Conversația | |
| 8.1.3. Seturi de baze | Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea | |
| 8.1.4-5.Metode MO (semiempirice, ab initio, post-HF) | Prelegerea; Explicația Conversația | |
| 8.1.6.Teoria functionalelor de densitate (DFT). | Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea | |
| 8.1.7.Metode hibride QM/MM: concepte ale mecanicii moleculare. | Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea | |

| | | |
|---|---|--|
| 8.1.8. Metode hibride QM/MM. Aplicații | Prelegerea; Explicația Conversația; Problematizarea; | |
| 8.1.9-10. Calculul proprietăților moleculare. | Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; | |

| | | |
|---|---|--|
| | Dezbateră; | |
| 8.1.11. Calculul stărilor excitate | Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea | |
| 8.1.12. Calculul stărilor de tranziție; aplicat în determinarea mecanismelor de reacție | Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea | |
| 8.1.13. Dinamica moleculară. Concepte de bază | Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea; | |
| 8.1.14. Aplicații ale dinamicii moleculare | Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea; | |

Bibliografie

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. J.M.M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*, John Wiley & Sons, N. Y., 1997.

| 8.2 Seminar / laborator | Metode de predare | Observații |
|---|--|--|
| 8.2.1. Prezentarea tematicii, cerințe, mod de întocmire referate. Noțiuni introductive. | Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Experimentul; | Sedintele de aplicatii se organizeaza din doua in doua saptamani (2 ore) |
| 8.2.2. Aplicații ale teoriei grupurilor. Diagrame de orbitali moleculari | Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; | |
| 8.2.3. Soft-uri specializate de chimie computațională: construirea de modele chimice; input și output | Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea | |
| 8.2.4. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor ab initio și semiempirice | Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; | |
| 8.2.5. Modelarea de proprietăților moleculare complexe | Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; | |
| 8.2.6. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular | Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; | |
| 8.2.7. Tehnici dinamice. Evaluare | Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; | |

Bibliografie

1. W.J. Hehre, A.J. Shusterman, W.W. Huang, *A laboratory Book of Computational Organic Chemistry*, Wavefunction, Irvine, California, 1996.

2. E.Lewars, Computational Chemistry, *Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, Kluwer Academic Publishers, 2003
3. *Spartan '04. Tutorial and User Guide*, Wavefunction, 2003..
4. 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 în concordanță cu competențele din Suplimentul la diploma și calificările din ANC.

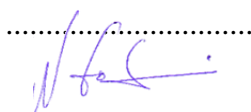
10. Evaluare

| Tip activitate | 10.1 Criterii de evaluare | 10.2 metode de evaluare | 10.3 Pondere din nota finală |
|---|---|--|------------------------------|
| 10.4 Curs | Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la curs Rezolvarea corectă a problemelor | Examen scris – notarea este condiționată de efectuarea activităților de laborator Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB | 70% |
| 10.5 Seminar/laborator | Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator Calitatea referatelor pregătite Activitatea desfășurată în laborator | Notarea se face pe baza raportului scris și a datelor din fișiere anexe solicitate pentru activitățile de modelare | 30% |
| 10.6 Standard minim de performanță | | | |
| <ul style="list-style-type: none"> Nota 5 (cinci). Cunoașterea noțiunilor introductive; aplicarea metodelor de modelare supra unui material cărui i se cunoaște compoziția chimică, identificând proprietățile ce pot fi prezise și nivelul de precizie/utilitate al metodelor aplicate | | | |

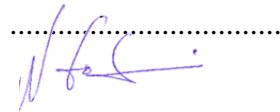
Data completării

13 aprilie 2021

Semnătura titularului de curs



Semnătura titularului de seminar



Data avizării în departament

13.04.2021

Semnătura directorului de departament

Acad. Cristian Sorin Silvestru

