

## 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, Inginerie chimică
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Inginerie Chimica Avansata de Proces /Inginerie Chimica

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei		Modelare și design molecular CMR7331						
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/Opt.	

### 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	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:					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					20
Tutoriat					5
Examinări					4
Alte activități: .....					-
3.7 Total ore studiu individual	69				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	5				

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

4.1 de curriculum	• Nu este cazul
4.2 de competențe	• Nu este cazul

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

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile în modul silențios sau închise</li> <li>• Studenții vor primi copii ale foilor de tip Powerpoint cu materialul de curs în format tipărit înainte de fiecare ședință de curs</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile în modul silențios sau închise</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Predarea referatului și rezultatelor de laborator se va face în format electronic și condiționează notarea la această materie</li> </ul>
--	---

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Recunoașterea și descrierea conceptelor, abordarilor, teoriilor, metodelor de modelare moleculară.</li> <li>• Explicarea și interpretarea unor concepte și proprietăți chimice prin intermediul modelării moleculare.</li> <li>• Aplicarea notiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor de chimie prin tehnici de modelare moleculară.</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 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.</li> <li>• 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.</li> <li>• 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.</li> </ul>

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Să familiarizeze studenții cu noțiuni de bază și avansate, concepte, teorii și modele de bază din domeniul chimiei și ingineriei chimice</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dobândirea cunoștințelor pentru îmbunătățirea performanțelor proceselor chimice și biochimice utilizând instrumente asistate de calculator și principii ale dezvoltării durabile</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor pentru dezvoltarea și utilizarea modelelor matematice și a simulărilor cu ajutorul unor programe specializate</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Introducere în modelarea moleculară, definirea domeniului, relația cu celelalte ramuri ale chimiei	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.2. Suprafețe de potențial	Prelegerea; Explicația; Conversația	
8.1.3. Mecanica moleculară	Prelegerea; Explicația Conversația	
8.1.4-5. Bazele teoriei orbitalilor moleculari	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.6. Metode MO semiempirice	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.7. Metode MO <i>ab initio</i>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.8. Metode post-Hartree Fock	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;Dezbateri;	

8.1.9. Teoria funcționalelor de densitate (DFT).	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.10. Metode hibride QM/MM	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea; Dezbateră;	
8.1.11. Calculul proprietăților sistemelor moleculare	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea Problematizarea	
8.1.12. Calculul proprietăților sistemelor moleculare: Determinarea distribuției de sarcină, potențiale moleculare electrostatice	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Calculul stărilor excitate	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. 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, Mecanica Moleculara, Presa Universitara Cluj-Napoca, 1996. 4. F.Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Prezentarea lucrărilor, cerințe, mod de întocmire referate. Noțiuni introductive.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Experimentul;	
8.2.2. Construirea de modele moleculare pe calculator	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.3. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul mecanicii moleculare	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.4-5. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor ab initio și semiempirice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.6. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.7-8. Construirea modelelor implicând mai mult decât o moleculă; sisteme supramoleculare, nanosisteme	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.9-10. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular și supramolecular	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.11-12. Modelarea formei și energiei sistemelor supramoleculare și a nanosistemelor	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.13. Tehnici dinamice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.14. Evaluare	Test	

## 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 <https://sites.google.com/site/modelaresidesignmolecular/>

## 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 problematicei 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	80%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei 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	20%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>• Nota 5 (cinci).</li><li>• 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</li></ul>			

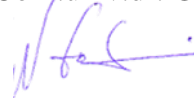
Data completării

13 aprilie 2021....

Data avizării în departament  
26.04.2021

Semnătura titularului de curs

Conf.univ.dr. Gabriela Nemes.



Semnătura directorului de departament  
Acad. Cristian Silvestru

