

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	CHIMIE AVANSATĂ / master in chimie

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Modelare și design molecular CME7334						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. dr. Ionuț-Tudor Moraru						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. dr. Ionuț-Tudor Moraru						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Ob\DS

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	42	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	<ul style="list-style-type: none"> Nu este cazul
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile în modul silențios sau închise Studentii 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	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile în modul silențios sau închise Predarea referatului și rezultatelor de laborator se va face în format

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Recunoașterea și descrierea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor de modelare moleculară. • Explicarea și interpretarea unor concepte și proprietăți chimice prin intermediul modelării moleculare. • Aplicarea notiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor de chimie prin tehnici de modelare moleculară.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • 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. • 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. • 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	<ul style="list-style-type: none"> • Să familiarizeze studenții cu noțiuni de bază și avansate, concepte, teorii și modele de bază din domeniul chimiei computaționale cu aplicații în chimie și inginerie chimică
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea cunoștințelor pentru îmbunătățirea performanțelor proceselor chimice și biochimice utilizând instrumente asistate de calculator și principii ale dezvoltării durabile • Dobândirea cunoștințelor pentru dezvoltarea și utilizarea modelelor matematice și a simulărilor cu ajutorul unor programe specializate

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 energie potențială	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; Dezbaterile;	

8.1.9. Teoria funcționalilor 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; calculul stărilor de tranziție	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, 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. Construirea de modele moleculare pe calculator	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Experimentul;	Sedintele de aplicatii se organizeaza din doua in doua saptamani (2 ore)
8.2.2 Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor de calcul (metode semiempirice și <i>ab-initio</i>)	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.3 Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor de calcul (metode <i>ab-initio</i> și DFT)	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.4. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.5 Construirea modelelor implicând mai mult decât o moleculă; sisteme supramoleculare, nanosisteme	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.6. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular și supramolecular	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.7. Modelarea formei și energiei sistemelor supramoleculare și a nanosistemelor. Evaluarea stabilității acestora	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 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 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"> • 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

10 aprilie 2023

Semnătura titularului de curs

.....

Semnătura titularului de seminar



Data avizării în departament

14.04.2023.....

Semnătura directorului de departament

Acad. Cristian Sorin Silvestru

