

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Univeristatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie si Inginerie Chimică
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie/chimist

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Topologie moleculara– CLM1160						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf.Dr. Gabriel Katona						
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf.Dr. Gabriel Katona						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	6	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	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	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					25
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					12
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					25
Tutoriat					4
Examinări					3
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"> • Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise • Nu va fi acceptată întârzierea
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise • Studenții se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator. • Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune • Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării • Pentru predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi • Este interzis accesul cu mâncare în laborator

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Operarea cu noțiuni de teoria grafurilor și chimie matematica • Abilitatea de a utiliza diferitele matrici topologice și indici în prelucrarea statistică a datelor • Capacitatea de a utiliza noțiuni de bază din chimia matematică în explicarea diferitelor proprietăți fizico-chimice și biologice
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată. • Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse. • Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • dobândirea cunoștințelor teoretice privind chimia matematică, dezvoltarea capacității de rezolvare de probleme.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Acumularea de cunoștințe teoretice de specialitate prin învățarea, înțelegerea și aplicarea conceptelor legate de chimia matematică reacție • Dezvoltarea capacității de analiză și sinteză a problemelor legate de relații structură chimică-proprietăți fizico-chimice și biologice

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Noțiuni introductive. Definiții în teoria grafurilor	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.2. Matrici topologice	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.3. Indici topologici	Prelegerea; Explicația Conversația	
8.1.4. Indici Cluj și Szeged	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.5. Matrici strat	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.6 Simetrie și similaritate	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.7. Structuri înalt simetrice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Dezbaterea;	
8.1.8. Rețele neuronale	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	

8.1.9. Notiuni de statistica matematica	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea; Dezbateră;	
8.1.10. Relatii cantitative structura-proprietati fizico-chimice	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.11. Relatii cantitative structura-activitate biologica	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12. Izomorfism si automorfism	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Nanostructuri de carbon	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Aplicatii ale grafurilor in chimie	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie 1. M.V. Diudea, Topologie moleculară, Ed. Compres, 1995. 2. M. V. Diudea, (Ed.), <i>QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors</i> , NOVA SCIENCE, New York, 2001., 438p. 3. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, <i>Molecular Topology</i> , NOVA SCIENCE, New York, 2002. , 329p. 4. O. M. Minailiuc ans M. V. Diudea, TI-MTD Model. Applications in Molecular Design. In : M. V. Diudea, Ed., <i>QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors</i> . NOVA SCIENCE, New York, 2001, pp. 363-388.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
Utilizarea programelor de calcul	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Constructia matricilor topologici	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Constructia matricilor strat	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Constructia indicilor	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Constructia indicilor exstinsi	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Analiza statistica a datelor	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Corelatii mono si multivariabile	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Relatii QSPR	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Relatii QSAR	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Matrici extinsi cu proprietati	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Realizare de structuri simetrice	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Similaritati moleculare. Aplicatii	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Rețele neuronale. Aplicatii	Explicația; Problematizarea; Conversația;	

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

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 – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice 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 Calitatea referatelor pregătite Activitatea desfășurată la seminar	Referat	20%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> • Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului. • Cunoașterea noțiunilor introductive; întocmirea corectă a unui bilanț de materiale (identificare sistem, subsisteme, scrierea corectă a ecuațiilor de bilanț de masă); elaborarea unui flux de separare (distilare simplă); elaborarea unei diagrame cascade pentru sinteza unui subsistem de schimbătoare de căldură. 			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

04 aprilie 2023

Conf.Dr. Katona Gabriel

Conf.Dr. Katona Gabriel

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

14 aprilie 2023

Prof.Dr.Ing. Paizs Csaba