

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Scoala Doctorala	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Doctorat
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Doctorat

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Chimie computațională – SDC-19-11						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. dr. Habil. Radu Silaghi-Dumitrescu						
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf. dr. Habil. Radu Silaghi-Dumitrescu						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	II	2.6. Tipul de evaluare	E#	2.7 Regimul disciplinei	Op

doctorandul poate opta pentru participare la activitati fara examen sau cu examen

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	2	Din care: 3.2 curs	1	3.3 seminar	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	24	Din care: 3.5 curs	12	3.6 seminar	12
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					100
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					100
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					18
Tutoriat					8
Examinări					
Alte activități:					-
3.7 Total ore studiu individual	226				
3.8 Total ore pe semestru	250				
3.9 Numărul de credite	10				

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"> Cursurile si seminariile se desfasoara in conditii de acces la internet si baze de date 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 tiparit inainte de fiecare ședință de curs Predarea referatului și rezultatelor se va face în format electronic și condiționează notarea la această materie
-------------------------------	--

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor din domeniul chimie computațională și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea și interpretarea proceselor specifice chimiei computaționale Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor avansate pentru rezolvarea problemelor specifice chimiei computaționale Analiza critică și utilizarea metodelor și tehnicilor avansate pentru evaluarea cantitativă și calitativă a noțiunilor de chimie computațională Aplicarea conceptelor și teoriilor din domeniul chimiei computaționale pentru elaborarea proiectelor și rezolvarea problemelor Abilitatea de a înțelege și interpreta date complementare pentru caracterizarea compușilor și proceselor chimice, de a exprima și argumenta interpretarea datelor pe baza corelării rezultatelor și a comparării cu date din literatura de specialitate
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> 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 Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate Abilitatea de a întocmi referate scrise și de a susține public aceste referate

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea de noțiuni privind folosirea chimiei computaționale pentru rezolvarea de probleme de cercetare, complementar altor tehnici experimentale
7.2. Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază privind chimia computațională Dezvoltarea capacității de rezolvare de probleme.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Introducere în chimia computațională, 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; Modele Fieser	
8.1.4. Bazele teoriei orbitalilor moleculari.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Modele Fieser	
8.1.5. Metode MO semiempirice.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	
8.1.6. Metode MO ab initio și post-Hartree-Fock	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.1.7. Teoria funcționalelor de densitate (DFT)	Prelegerea; Explicația;	

	Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.1.8. Metode hibride QM/MM	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.1.9. Proprietăți spectroscopice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.1.10. Determinarea distribuției de sarcină, potențiale moleculare electrostatice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.1.11-12. Aplicații în chimia medicinală	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	Metode de predare	Observații
8.2.1. Pachete de software în chimia computațională; elemente de bază ale arhitecturii și manipularii fișierelor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.2.2-3. Construirea, editarea, importarea, exportarea modelelor/(bio)moleculilor; criterii de calitate	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.2.4. Tipuri de calcule și metode în pachetele de software cele mai comune; alegerea metodologiei de calcul.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.2.5-6. Calcule single-point, optimizări de geometrie, elemente de conformație; criterii de judecată a succesului procedurii	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.7-8 Calcule ale proprietăților moleculare și supramoleculare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.9-10 Calcule ale proprietăților legate de reactivitate; stări de tranziție	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.11-12 Calcule asupra sistemelor biologice; situsuri active	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
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.		

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

10. Evaluare# (doar pentru doctoranzii care solicita acest lucru)

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	Examen scris	50%
	Modul de gândire, corectitudinea și argumentarea soluțiilor propușe		
10.5 Seminar/laborator	Activitatea desfășurată la seminar	Prezentarea și interpretarea de rezultate ale calculelor desfășurate pe teme atribuite pe parcursul seminarului	50%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> Nota 5 (cinci) 			

Data completării

12.12.2018

Semnătura titularului de curs



Semnătura titularului de seminar



Data avizării în CSDC

01 martie 2018

Semnătura directorului SDC

Prof. Dr. Ion Grosu

Membru Corespondent al Academiei Romane

