

## 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 – <b>SDC-19-11</b>						
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	• 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>• Cursurile si seminariile se desfasoara in conditii de acces la internet si baze de date</li> <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> <li>• Predarea referatului și rezultatelor 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>Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor din domeniul chimie computațională și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională</li><li>Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea și interpretarea proceselor specifice chimiei computaționale</li><li>Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor avansate pentru rezolvarea problemelor specifice chimiei computaționale</li><li>Analiza critică și utilizarea metodelor și tehnicilor avansate pentru evaluarea cantitativă și calitativă a noțiunilor de chimie computațională</li><li>Aplicarea conceptelor și teoriilor din domeniul chimiei computaționale pentru elaborarea proiectelor și rezolvarea problemelor</li><li>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</li></ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"><li>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</li><li>Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li><li>Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română</li><li>Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate</li><li>Abilitatea de a întocmi referate scrise și de a susține public aceste referate</li></ul>

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

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

## 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;	
<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	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"> <li>Nota 5 (cinci)</li> </ul>			

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

