

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
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	CHIMIE AVANSATĂ / master în chimie

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Modelare și design molecular CMR7331						
2.2 Titularul activităților de curs	Petronela M. Petrar						
2.3 Titularul activităților de seminar	Petronela M. Petrar						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Op

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
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					60
Tutoriat					4
Examinări					4
Alte activități:					-
3.7 Total ore studiu individual	108				
3.8 Total ore pe semestru	150				
3.9 Numărul de credite	6				

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

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

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<p>C4. Caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</p> <p>4.1. Identificarea metodelor adecvate și specifice pentru caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</p> <p>C4.2. Stabilirea modalităților de atribuire a structurii și corelarea informației oferite de diverse metode</p> <p>C4.3. Utilizarea corectă și adecvată a metodelor specifice de caracterizare structurală a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</p> <p>C4.4. Analiza critică a metodelor de caracterizare structurală a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</p> <p>C4.5. Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatură pentru caracterizarea structurală completă a unui reprezentant din clasele de compuși studiate</p> <p>C5. Studiul relației structură –proprietăți în design-ul, obținerea și caracterizarea unor materiale cu diverse aplicații</p> <p>C5.1. Descrierea și utilizarea de concepte, teorii și metode avansate în identificarea particularităților structurale care conferă unor compuși potențial aplicativ</p> <p>C5.2. Stabilirea modalităților teoretice și experimentale de corelare structură-proprietăți</p> <p>C5.3. Utilizarea relației structură-proprietăți în determinarea potențialului aplicativ a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</p> <p>C5.4. Analiza critică a diverselor abordări teoretice și experimentale în determinarea proprietăților care recomandă un compus/o clasă de compuși pentru utilizarea ca material</p> <p>C5.5. Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatură pentru identificarea relației dintre structură și proprietăți și caracterizarea unui reprezentant cu potențial aplicativ din clasele de compuși studiate</p>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate

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 modelării moleculare
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea cunoștințelor pentru îmbunătățirea performanțelor proceselor chimice utilizând instrumente asistate de calculator • Dobândirea cunoștințelor pentru dezvoltarea și utilizarea chimiei cuantice în studiul structurilor moleculare și a proceselor chimice • Dobândirea cunoștințelor pentru determinarea și interpretarea proprietăților structurale ale compușilor chimici cu ajutorul modelării moleculare

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-HF	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;Dezbaterea;	
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; Dezbaterea;	
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;	
Bibliografie 1. C. J. Cramer, <i>Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models</i> , Wiley, 2004. 2. E. Lewars, <i>Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics</i> , Kluwer Academic Publishers, 2003 3. I. Silaghi-Dumitrescu, D. Horvath, <i>Mecanică Moleculară</i> , Presa Universitară Cluj-Napoca, 1996. 4. F. Jensen, <i>Introduction to Computational Chemistry</i> , Wiley, 1999.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Prezentarea lucrărilor, cerințe, mod de întocmire a referatelor. Noțiuni recapitulative.	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 <i>ab initio</i> și	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;	

semiempirice	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.
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 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	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	40%
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	Notarea se face pe baza raportului scris și a datelor din fișiere anexe solicitate pentru activitățile de modelare	60%
	Calitatea referatelor pregătite		
	Activitatea desfășurată în timpul laboratorului		
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 căruia i se			

cunoaște compoziția chimică, identificând proprietățile ce pot fi prezise și nivelul de precizie/utilitate al metodelor aplicate

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

7.05.2015

Petrar

Petrar

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

.....

Prof. Dr. Cristian Silvestru

.....11 mai 2015.....

Cristian Silvestru