

## 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 in chimie

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Structura și dinamica moleculară CMX6532</b>						
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	Opțional

### 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"> <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> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile în modul silențios sau închise</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Predarea referatului și rezultatelor de laborator 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>• Caracterizarea structurală complexă compusi anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• Studiul relației structură – proprietăți în design-ul, obținerea și caracterizarea unor materiale cu diverse aplicații</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 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</li> <li>• 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</li> <li>• 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</li> </ul>

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Să familiarizeze studenții cu noțiuni de bază și avansate, concepte, teorii și modele de bază din domeniul structurii și dinamici moleculare</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dobândirea cunoștințelor necesare studiului sistemelor moleculare utilizând instrumente asistate de calculator</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor pentru utilizarea modelelor cuantice în caracterizarea sistemelor moleculare și supramoleculare</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Introducere în modelarea moleculară, definirea domeniului, relația cu celelalte ramuri ale chimiei. Teoria orbitalilor moleculari: concepte de bază, diagrame de orbitali moleculari	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.2. Grupuri punctuale. Simetria orbitalilor. Diagrame de orbitali moleculari.	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.3. Seturi de baze	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.4-5. Metode MO (semiempirice, ab initio, post-HF)	Prelegerea; Explicația Conversația	
8.1.6. Teoria funcționalelor de densitate (DFT).	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.7. Metode hibride QM/MM: concepte ale mecanicii moleculare.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.8. Metode hibride QM/MM. Aplicații	Prelegerea; Explicația Conversația; Problematizarea;	
8.1.9-10. Calculul proprietăților moleculare.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	

	Dezbateră;	
8.1.11.Calculul stărilor excitate	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.12.Determinarea mecanismelor de reacție prin calculul stărilor de tranziție	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.13.Dinamica moleculară. Concepte de bază	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14.Aplicații ale dinamicii moleculare	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
<b>Bibliografie</b> 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. 5. J.M.M. Haile, <i>Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods</i> , John Wiley&Sons, N. Y., 1997.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Prezentarea tematicii, cerințe, mod de întocmire referate. Noțiuni introductive.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Experimentul;	
8.2.2. Aplicații ale teoriei grupurilor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.3. Diagrame de orbitali moleculari	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.4. Soft-uri specializate de chimie computațională: construirea de modele chimice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.2.5. Soft-uri specializate de chimie computațională: input și output	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.6. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor ab initio și semiempirice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.7-8. Modelarea de proprietăților moleculare complexe	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.9-10. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.11. Concepte de bază în modelarea sistemelor supramoleculare	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.12. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor mecanicii moleculare și QM-MM.	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.
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

**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 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	70%
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	30%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Nota 5 (cinci).</li> <li>• 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</li> </ul>			

Data completării

04 mai 2015

Semnătura titularului de curs

..... *Petrar* .....

Semnătura titularului de seminar

..... *Petrar* .....

Data avizării în departament

.....

Semnătura directorului de departament

Prof. Dr. Cristian Silvestru

*Cristian Silvestru*

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