

## 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 și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Tehnici moderne de sinteza in chimie

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Elemente de modelare moleculară <b>CMM6634</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	<b>Lector dr. ing. Attila-Zsolt Kun</b>						
2.3 Titularul activităților de seminar	<b>Lector dr. ing. Attila-Zsolt Kun</b>						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Opt

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	<b>4</b>	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	<b>2</b>
3.4 Total ore din planul de învățământ	<b>56</b>	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	<b>28</b>
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					<b>20</b>
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					<b>23</b>
Tutoriat					9
Examinări					3
Alte activități: .....					-
3.7 Total ore studiu individual	<b>69</b>				
3.8 Total ore pe semestru	<b>125</b>				
3.9 Numărul de credite	<b>5</b>				

### 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>• Sală prevăzută cu tablă și videoproiector.</li> <li>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> <li>• Studenții vor primi copii ale foilor de tip Powerpoint cu materialul de curs în format electronic după 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 închise</li> <li>• Studenții de preferință se vor prezenta la seminar/laborator cu laptop propriu</li> <li>• Studentii trebuie sa participe la seminar. Rezolvarea temelor pe parcursul semestrului este obligatorie.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• În acord cu principiile și valorile promovate, potrivit Codului de Etică al Universității Babeș-Bolyai art. 39, „discriminarea sau tratarea inegală a membrilor comunității universitare, bazată explicit ori implicit pe criterii extraprofesionale precum rasa, sexul, etnia, religia, apartenența la grupuri minoritare, convingerile politice, orientările și preferințele personale etc.” sunt interzise și reprezintă încălcări ale obligațiilor privind dreptatea și echitatea.</li> <li>• În cursul activităților on-site se vor respecta regulile de protecția sănătății și distanțare socială impuse de situație</li> </ul>	

## 6. Competențele specifice acumulate

competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>C1. Caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</b></li> <li>• C1.1. Identificarea metodelor adecvate și specifice pentru caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• C1.2. Stabilirea modalităților de atribuire a structurii și corelarea informației oferite de diverse metode</li> <li>• C1.3. Utilizarea corectă și adecvată a metodelor specifice de caracterizare structurală a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• C1.4. Analiza critică a metodelor de caracterizare structurală a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• C1.5. Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatura pentru caracterizarea structurală completă a unui reprezentant din clasele de compuși studiate</li> <li>• <b>C2. Studiul relației structură –proprietăți în design-ul, obținerea și caracterizarea unor materiale cu diverse aplicații</b></li> <li>• C2.1. Descrierea și utilizarea de concepte, teorii și metode avansate în identificarea particularităților structurale care conferă unor compuși potențial aplicativ</li> <li>• C2.2. Stabilirea modalităților teoretice și experimentale de corelare structură-proprietăți</li> <li>• C2.3. Utilizarea relației structură-proprietăți în determinarea potențialului aplicativ a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• C2.4. Analiza critică a diverselor abordări teoretice și experimentale în determinarea proprietăților care recomandă un compus/o clasă de compuși pentru utilizarea ca material</li> <li>• C2.5. 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</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</li> <li>• Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.</li> </ul>

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Familiarizarea studenților cu noțiuni de bază și avansate, concepte, teorii și modele de bază din domeniul modelării moleculare</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Îmbogățirea cunoștințelor de chimie structurală, prin adăugarea de noi cunoștințe, noi explicații la bagajul deja existent; îmbogățirea limbajului chimic. Utilizarea corectă a noțiunilor de chimie.</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor pentru îmbunătățirea performanțelor proceselor chimice utilizând instrumente asistate de calculator</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor pentru dezvoltarea și utilizarea chimiei cuantice în studiul structurilor moleculare și a proceselor chimice</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor pentru determinarea și interpretarea proprietăților structurale ale compușilor chimici cu ajutorul modelării moleculare.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
1. Introducere în modelarea moleculară, definirea domeniului, relația cu celelalte ramuri ale chimiei	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Suprafețe de potențial	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Mecanica moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Bazele teoriei orbitalilor moleculari. Seturi de bază	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Metoda MO ab initio Hartree-Fock	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	

6. Metode MO semiempirice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
7. Metode MO avansate, post- Hartree-Fock	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Teoria funcționalelor de densitate (DFT).	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
9. Metode hibride QM/MM	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Metode de dinamică moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Calculul proprietăților sistemelor moleculare	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Calculul proprietăților sistemelor moleculare: Determinarea distribuției de sarcină, potențiale moleculare electrostatice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Calculul stărilor excitate	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Determinarea mecanismelor de reacție prin calculul stărilor de tranziție	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, Mecanică Moleculară, Presa Universitară Cluj-Napoca, 1996. 4. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999. 5. Gy.Tasi Számítógépes kémia, JATEPress Szeged, 2010 6. Mueller M.R. Fundamentals of Quantum Chemistry.. Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computations Kluwer Academic Publishers, 2001		
<b>8.2 Seminar / Laborator</b>	Metode de predare	Observații
1. Prezentarea lucrărilor, cerințe, mod de întocmire a referatelor. Noțiuni recapitulative.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Construirea de modele moleculare pe calculator	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul mecanicii moleculare	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor ab initio și semiempirice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic 1.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
6. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic 2.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
7. Construirea modelelor implicând mai mult decât o moleculă: sisteme supramoleculare, nanosisteme	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Evaluare	Test	
9. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Modelarea reactivității chimice la nivel supramolecular.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Modelarea formei și energiei sistemelor supramoleculare.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Modelarea formei și energiei nanosistemelor	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Tehnici dinamice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Evaluare pe parcurs, prezentare referat	Test	

**Bibliografie**

1. W. J. Hehre, A. J. Shusterman, W. W. Huang, A laboratory Book of Computational Organic Chemistry, Wavefunction, Irvine, California, 1996.
2. Spartan '06. Tutorial and User Guide, Wavefunction, 2005.
3. 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 – înțelegerea și aplicarea corectă a problematicei tratate la curs  Rezolvarea corectă a exercițiilor și problemelor.	Verificare pe parcurs – accesul este condiționat de rezolvarea temelor de seminar  Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	40%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar. Rezolvarea corectă a temelor pe parcursul semestrului.	Temele de seminar se predau la datele stabilite de comun acord cu studenții. Notarea se face pe baza raportului scris și a datelor din fișiere anexe solicitate pentru activitățile de modelare	40%
	Rezolvarea sarcinilor practice - cercetare	Întocmirea și prezentarea unui referat pe baza calculelor proprii	
10.6 Activități pe parcurs	Rezolvare de exerciții și probleme primite pe parcursul semestrului	teme de casă primite pentru rezolvare	20%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Nota 5 (cinci) la examen conform baremului.</li> </ul>			

Data completării  
04.04.2023

Semnătura titularului de curs  
Lector Dr. ing. KUN Attila-Zsolt



Semnătura titularului de seminar  
Lector Dr. ing. KUN Attila-Zsolt



Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

05.04.2023

Prof. habil. dr. ing. Csaba PAIZS

