**FIŞA DISCIPLINEI**

**1. Date despre program**

|  |  |
| --- | --- |
| 1.1 Instituţia de învăţământ superior | Universitatea Babeş-Bolyai, Cluj-Napoca |
| 1.2 Facultatea | Facultatea de Chimie şi 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 activităţilor de curs | | | | | Conf. dr. Habil. Radu Silaghi-Dumitrescu | | | | |
| 2.3 Titularul activităţilor 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 activităţilor 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 învăţământ | 24 | | Din care: 3.5 curs | | 12 | 3.6 seminar | 12 |
| Distribuţia fondului de timp: | | | | | | | ore |
| Studiul după manual, suport de curs, bibliografie şi notiţe | | | | | | | 100 |
| Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate şi pe teren | | | | | | | 100 |
| Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii şi eseuri | | | | | | | 18 |
| Tutoriat | | | | | | | 8 |
| Examinări | | | | | | |  |
| Alte activităţi: .................. | | | | | | | - |
| 3.7 Total ore studiu individual | | 226 | |  | | | |
| 3.8 Total ore pe semestru | | 250 | |
| 3.9 Numărul de credite | | 10 | |

**4. Precondiţii** (acolo unde este cazul)

|  |  |
| --- | --- |
| 4.1 de curriculum |  Nu este cazul |
| 4.2 de competenţe |  Nu este cazul |

**5. Condiţii** (acolo unde este cazul)

5.1 De desfăşurare a cursului

 Cursurile si seminariile se desfasoara in conditii de acces la internet si

baze de date

 Studenţii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile în modul

silenţios sau închise

 Studenţii vor primi copii ale foilor de tip Powerpoint cu materialul de

curs în format tiparit inainte de fiecare şedinţă de curs

 Predarea referatului şi rezultatelor se va face în format electronic şi

condiţionează notarea la această materie

**6. Competenţele specifice acumulate**

|  |  |
| --- | --- |
|  |  Definirea noţiunilor, conceptelor, teoriilor şi modelelor din domeniul chimie  computaționale si utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională   Utilizarea cunoştinţelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea şi  interpretarea proceselor specifice chimiei computaționale   Identificarea şi aplicarea conceptelor, metodelor şi teoriilor avansate pentru rezolvarea  problemelor specifice chimiei computaționale   Analiza critică şi utilizarea metodelor şi tehnicilor avansate pentru evaluarea cantitativă şi  calitativă a noțiunilor de chimie computațională   Aplicarea conceptelor şi teoriilor din domeniul chimiei computaționale pentru elaborarea  proiectelor si rezolvarea problemelor   Abilitatea de a întelege şi interpreta date complementare pentru caracterizarea  compușilor si proceselor chimice, de a exprima şi argumenta interpretarea datelor pe baza corelării rezultatelor şi a comparării cu date din literatura de specialitate |
|  |  Executarea sarcinilor solicitate conform cerintelor precizate si în termenele impuse, cu  respectarea normelor de etica profesionala si de conduita morala, urmând un plan de lucru  prestabilit   Rezolvarea sarcinilor solictate în concordanta cu obiectivele generale stabilite prin  integrarea în cadrul unui grup de lucru   Informarea si documentarea permanenta în domeniul sau de activitate în limba româna   Preocuparea pentru perfecţionarea rezultatelor activităţii profesionale prin implicarea în  activităţile desfăşurate   Abilitatea de a întocmi referate scrise şi de a susţine public aceste referate |

**7. Obiectivele disciplinei** (reieşind din grila competenţelor acumulate)

|  |  |
| --- | --- |
| 7.1 Obiectivul general al disciplinei |  Dobândirea de noţiuni privind folosirea chimiei computaționale  pentru rezolvarea de probleme de cercetare, complementar altor tehnici experimentale |
| 7.2. Obiectivele specifice |  Dobândirea cunoştinţelor teoretice de bază privind chimia  computațională   Dezvoltarea capacităţii de rezolvare de probleme. |

**8. Conţinuturi**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 8.1 Curs | Metode de predare | Observaţii |
| 8.1.1. Introducere in chimia computațională, definirea domeniului, relația cu celelalte ramuri ale chimiei | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia |  |
| 8.1.2. Suprafețe de potențial | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia |  |
| 8.1.3. Mecanica moleculară | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Modele Fieser |  |
| 8.1.4. Bazele teoriei orbitalilor moleculari. | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Modele Fieser |  |
| 8.1.5. Metode MO semiempirice. | Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea |  |
| 8.1.6. Metode MO ab initio și post-Hartree-Fock | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; |  |
| 8.1.7. Teoria funcționalelor de densitate (DFT) | Prelegerea; Explicaţia; |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; |  |
| 8.1.8. Metode hibride QM/MM | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; |  |
| 8.1.9. Proprietăți spectroscopice | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; |  |
| 8.1.10. Determinarea distributiei de sarcina, potentiale moleculare electrostatice | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; |  |
| 8.1.11-12. Aplicații în chimia medicinală | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; 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 | Observaţii |
| 8.2.1. Pachete de software în chimia computațională; elemente de bază ale arhitecturii și manipulării fișierelor | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea |  |
| 8.2.2-3. Construirea, editarea, importarea, exportarea modelelor/(bio)moleculelor; criterii de calitate | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea |  |
| 8.2.4. Tipuri de calcule și metode în pachetele de software cele mai comune; alegerea metodologiei de calcul. | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea |  |
| 8.2.5-6. Calcule single-point, optimizări de geometrie, elemente de conformație; criterii de judecată a succesului procedurii | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; |  |
| 8.2.7-8 Calcule ale proprietăților moleculare și supramoleculare | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; |  |
| 8.2.9-10 Calcule ale proprietăților legate de reactivitate; stări de tranziție | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; |  |
| 8.2.11-12 Calcule asupra sistemelor biologice; situsuri active | Explicaţia; Conversaţia; 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 conţinuturilor disciplinei cu aşteptările reprezentanţilor comunităţii epistemice, asociaţiilor profesionale şi angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului**

 Prin însuşirea conceptelor teoretico-metodologice şi abordarea aspectelor practice incluse în

disciplina **Chimie computațională** doctoranzii dobândesc un bagaj de cunoştinţe consistent, în concordanţă cu competenţele parţiale cerute pentru ocupaţiile 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 – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate | Examen scris | 50% |
| Modul de gândire, corectitudinea şi argumentarea soluţiilor propuse |
| 10.5 Seminar/laborator | Activitatea desfăşurată la seminar | Prezentarea și interpretarea de rezultate ale calculelor desfășurate pe temele atribuite pe parcursul seminarului | 50% |
| 10.6 Standard minim de performanţă | | | |
|  Nota 5 (cinci) | | | |

Data completării Semnătura titularului de curs Semnătura titularului de seminar

12.12.2018

Data avizării în CSDC

Semnătura directorului SDC

01 martie 2018

Prof. Dr. Ion Grosu

Membru Corespondent al Academiei Romane