

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Fizică
1.3 Departamentul	Departamentul de Fizică Biomoleculară
1.4 Domeniul de studii	Fizică
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu	Biofizică și Fizică Medicală

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Modelarea sistemelor biomoleculare						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. dr. Vasile Chiș						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. dr. Vasile Chiș						
2.4 Titularul activităților de laborator	Prof.dr. Vasile Chiș						
2.5 Anul de studiu	II	2.6 Semestrul	IV	2.7 Tipul de evaluare	Ex	2.8 Regimul disciplinei	DA

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	Din care:					
3.2 curs	2	3.3 seminar	0	3.4 laborator	2		
3.5 Total ore din planul de învățământ	56	Din care:					
3.6 curs	28	3.7 seminar	0	3.8 laborator	28		
Distribuția fondului de timp:							ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe							28
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren							18
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri							24
Tutoriat							14
Examinări							4
Alte activități:							-
3.9 Total ore studiu individual	72						
3.10 Total ore pe semestru	132						
3.11 Numărul de credite	5						

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	Fizica moleculei, Calcul diferențial și integral
4.2 de competențe	Utilizarea calculatorului, prelucrarea și analiza informației

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Sală adecvată, tablă, videoproiector, computer
--------------------------------------	--

5.2 de desfășurare a seminarului	-
5.3 de desfășurare a laboratorului	Sală adecvată, tablă, videoproiector, rețea de calculatoare, acces internet

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> - Aplicarea cunoștințelor dobândite pentru definirea și formularea problemelor de cercetare în chimiei computaționale - Efectuarea de calcule (experimente in silico) pe sisteme moleculare simple și complexe evaluarea rezultatelor acestora pe baza modelelor teoretice existente. - Utilizarea infrastructurii de calcul pentru efectuarea simulări și modelări moleculare și pentru extragerea informației din baze de date specifice - Corelarea rezultatelor experimentale și teoretice - Comunicarea ideilor științifice complexe, a concluziilor experimentelor sau a rezultatelor unui proiect științific. - Utilizarea echipamentelor și programelor de calcul de proprietăți moleculare în domenii restrânse sau interdisciplinare. - Capacitate avansată de planificare și organizare. - Dezvoltarea și folosirea de aplicații informatice pentru rezolvarea diferitelor probleme de fizica - Abordarea interdisciplinara a unor teme din domeniul fizicii
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> - Analiza critică și evaluarea modelelor științifice - Participarea la un proiect de cercetare, planificarea și conducerea proiectelor de cercetare - Aplicarea valorilor și eticii profesiei de cercetător și executarea responsabilă a sarcinilor profesionale în condiții de autonomie și luare de decizii bazate pe evaluare și autoevaluare. - Aplicarea strategiilor de muncă eficientă în echipă multidisciplinară pe diverse paliere ierarhice. - Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională. - Autoevaluarea obiectivă a nevoii de formare profesională, continuă, în scopul inserției pe piața muncii și al adaptării la dinamica cerințelor acestuia și pentru dezvoltarea personală și profesională și utilizarea eficientă a abilităților multilingvistice și a cunoștințelor de tehnologia informației și a comunicării. - Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată. - Identificarea rolurilor și responsabilităților într-o echipă și aplicarea de tehnici de relaționare și muncă eficientă în cadrul echipei. - Documentarea în limba română și cel puțin într-o limbă străină, pentru dezvoltarea profesională și personală, prin formare continuă și adaptarea eficientă la noile descoperiri științifice. <p>Identificarea oportunităților de formare continuă și valorificarea eficientă a resurselor și tehnicilor de învățare pentru propria dezvoltare.</p>

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Însușirea fundamentelor teoretice și computaționale și formarea deprinderilor practice pentru modelarea sistemelor moleculare cu ajutorul computerelor
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Însușirea principiilor, metodelor și tehnicilor computaționale pentru calculul diferitelor proprietăți moleculare • Utilizarea eficientă a resurselor computaționale pentru modelări moleculare • Formarea abilităților de calcul și analiză a proprietăților moleculare și utilizarea acestora în caracterizarea proprietăților materialelor • Transfer de cunoștințe și înțelegerea fenomenelor complexe din fizica cuantică, fizica moleculei și informatică • Dezvoltarea direcțiilor de interdisciplinaritate: fizică, informatică, chimie, medicină, mediu

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Curs 1 Introducere Clasificarea metodelor de calcul; Metode empirice și semi-empirice; Metode de chimie cuantică Tipuri de calcule; Matricea Z	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 2 Teoria Hartree-Fock-Roothan Unități atomice Hamiltonianul molecular Aproximația Born-Oppenheimer Aproximația Hartree	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 3 Teoria Hartree-Fock-Roothan Ecuațiile Hartree-Fock și Hartree-Fock-Roothaan	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 4 Seturi de bază Orbitali STO și GTO; Funcții de bază Analiza de populație Mulliken	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 5 Metode de corelare electronică Metode post-Hartree-Fock pentru corelarea electronică (CI, MP2, CC)	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 6 Principiile metodelor DFT Teoremele Hohenberg-Kohn; Formalismul Kohn-Sham;	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 7 Principiile metodelor DFT	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat	2 ore

Aproximația densității locale; Funcționale de schimb-corelare	și mijloace vizuale	
Curs 8 Stări moleculare excitate Teoria DFT dependentă de timp (TD-DFT) Calculul de tip TD-DFT	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator și mijloace vizuale	2 ore
Curs 9 Efecte de solvent și metode de solvatare Modele continue de solvatare Modele discrete de solvatare	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator și mijloace vizuale	2 ore
Curs 10 Termochimie Calculul parametrilor termochimici; Calculul potențialelor de reducere-oxidare	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 11 Calculul spectrelor moleculare Calculul spectrelor vibraționale (IR și Raman) Aproximația armonică și anarmonică Scalarea frecvențelor de vibrație calculate	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 12 Calculul spectrelor moleculare Calculul spectrelor de absorbție electronică Calculul spectrelor de fluorescență Calculul timpilor de fluorescență radiativă	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 13 Calculul spectrelor moleculare Calculul spectrelor RMN și RES Extrapolarea la limita unui set de bază complet	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 14 Modelarea interacțiunilor inter-moleculare Calculul energiilor de interacțiune inter-moleculară Eroarea suprapunerii seturilor de bază (metoda CP) Interacțiuni intermoleculare slabe – formalismul DFT-D	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore

Bibliografie

1. J.B. Foresman, A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd edition, 2015, <http://expchem3.com/> (http://www.gaussian.com/g_pix/e3_cover.jpg)
2. A. Frisch, Gaussian 09W Reference, http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/g09w_ref_toc.htm
3. Eileen Frisch, Hrant P. Hratchian, Roy D. Dennington II, Todd A. Keith, John Millam, GaussView reference, http://www.gaussian.com/g_tech/gv5ref.htm (http://www.gaussian.com/g_dl/gv5ref_nav.pdf.zip)
4. A. Szabo, N.S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry; Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, McGraw-Hill Publishing Company, New York, 1989
5. Wolfram Koch, Max C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, Wiley, 2001
6. D. C. Young, *Computational Chemistry*, John Wiley and Sons, 2001

7. W. Kohn, A. D. Becke, and R. G. Parr, Density Functional Theory of Electronic Structure, J. Phys. Chem. 100, 12974-12980 (1996)
8. M. L. Senent, S. Wolson, Intramolecular Basis Set Superposition Errors, International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 82, 282-292 (2001)
9. Christopher J. Cramer and Donald G. Truhlar, Implicit Solvation Models: Equilibria, Structure, Spectra and Dynamics, Chem. Rev. 99, 2161-2200(1999)
10. Martin Schutz, Steve Brdarski, Per-Olof Widmark, Roland Lindh, and Gunnar Karlstrom, The water dimer interaction energy: Convergence to the basis set limit at the correlated level, J. Chem. Phys. 107 4597-4605 (1997)
11. A mathematical and computational review of Hartree-Fock SCF methods in quantum chemistry by P. Echenique and J.L. Alonso (<http://arxiv.org/abs/0705.0337>)
12. Quantum Chemistry-Computational Chemistry by D. Sherrill (<http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/>)

8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
8.3 Laborator	Metode de predare	Observații
1. Pachetele de programe Gaussian și GaussView	Prelegere, discuție individuală	2 ore
2. Specificarea geometriei moleculelor; Coordonate carteziene; Formalismul matricii Z	Discuție individuală	2 ore
3. Optimizarea geometriilor moleculelor; Optimizări totale și parțiale	Discuție individuală	2 ore
4. Bariere de rotație la etan și bariera de inversie la amoniac	Discuție individuală	2 ore
5. Studiul interacțiunilor H-bonding bazele ADN	Discuție individuală	2 ore
6. Analiza conformațională; Studiul tautomerilor purinelor; Populații Boltzmann relative	Discuție individuală	2 ore
7. Potențialul de ionizare și afinitatea electronică pentru o serie de molecule isoelectronice molecules; Afinitatea protonică a piridinei.	Discuție individuală	2 ore
8. Moduri normale de vibrație; Calculul spectrelor de vibrație	Discuție individuală	2 ore
9. Calculul spectrelor de absorbție electronică pentru pigmenți organici: corelarea datelor experimentale cu cele teoretice	Discuție individuală	2 ore
10. Calculul spectrelor RMN; Influența solventului; Influența interacțiunilor H-bonding;	Discuție individuală	2 ore
11. Calculul spectrelor RES pentru sisteme	Discuție individuală	2 ore

paramagnetice; Extrapolare CBS a constantelor de cuplaj hiperfin pentru radicalul CH ₃ .		
12. Efecte de solvent; Modelarea continuă și discretă a solventului; Comparația proprietăților moleculare în stare gazoasă și în solvent	Discuție individuală	2 ore
13. Calculul energiei de interacțiune pentru complecși moleculari; Eliminarea BSSE	Discuție individuală	2 ore
14 Stări moleculare excitate; optimizarea geometriei și calculul energiei de excitare adiabatică	Discuție individuală	2 ore

Bibliografie

1. J.B. Foresman, A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd edition, 2015, <http://expchem3.com/> (http://www.gaussian.com/g_pix/e3_cover.jpg)
2. A. Frisch, Gaussian 09W Reference, http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/g09w_ref_toc.htm
3. Aelen Frisch, Hrant P. Hratchian, Roy D. Dennington II, Todd A. Keith, John Millam, GaussView reference, http://www.gaussian.com/g_tech/gv5ref.htm (http://www.gaussian.com/g_dl/gv5ref_nav.pdf.zip)
4. J.A. Pople, D.L. Beveridge, *Aproximate Molecular Orbitals Theory*, McGraw-Hill, New York, 1970
5. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley and Sons, New York, 2001
6. T. Heine, J.O. Joswig, A. Gelessus, *Computational Chemistry Workbook*, Wiley-VCH, 2009
7. C.J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry*, John-Wiley and Sons, 2002
8. C.F. Macrae, P.R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, G.P. Shields, R. Taylor, M. Rowler, J. van de Streek, Mercury: visualization and analysis of crystal structures, *J. Appl. Crystalogr.* 39:453-457, 2006
9. Molegro Molecular Viewer, version 2.5. Molegro ApS; Aarhus, Denmark: 2012
10. www.gaussian.com

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

Conținutul disciplinei este în concordanță cu ceea ce se studiază în alte centre universitare din țară (Timișoara, Iași, București) și străinătate. Pentru adaptarea la cerințele impuse de piața de muncă, conținutul disciplinei a fost armonizat cu cerințele impuse de specificul învățământului preuniversitar, al institutelor de cercetare și al mediului de afaceri.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Cunoștințe dobândite	Examen scris	50
10.5 Seminar	Activitate	Tematici rezolvate	0

10.6	Activitate	Experimente realizate	50
Laborator			
10.7 Standard minim de performanță			
Optimizarea geometriei, calculul și atribuirea spectrului de vibrație, de absorbție și RMN al unei molecule de dimensiune medie			

Semnătură titular curs
Prof.dr. Vasile Chiș

Semnătură titular seminar

Semnătură titular laborator
Prof.dr. Vasile Chiș

Data completării

Data avizării în departament

Semnătură director de
departament

25.04.2018

27.04.2018