

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Matematică și Informatică
1.3 Departamentul	Departamentul de Informatică
1.4 Domeniul de studii	Informatică
1.5 Ciclu de studii	Master
1.6 Programul de studiu	High Performance Computing and Big Data Analytics/ Calcul de Inalta Performanta si analiza volumelor mari de date

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei		Calculul Proprietăților Moleculare / Molecular Properties Calculations					
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	Opt.

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	0	3.4 laborator	1		
3.5 Total ore din planul de învățământ	42	Din care:					
3.6 curs	28	3.7 seminar	0	3.8 laborator	14		
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							14
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri							28
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 domeniul chimiei computaționale- Efectuarea de calcule (experimente <i>in silico</i>) pe sisteme moleculare simple și complexe și evaluarea rezultatelor acestora pe baza modelelor teoretice existente.- Utilizarea infrastructurii de calcul pentru efectuarea de 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.- Dezvoltarea și folosirea de aplicații informatice pentru rezolvarea diferitelor probleme de fizică- Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul fizicii- Capacitate avansată de planificare și organizare.
--------------------------------	---

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 acesteia 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. - Identificarea oportunităților de formare continuă și valorificarea eficientă a resurselor și tehnicilor de învățare pentru propria dezvoltare.
--------------------------------	---

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Insușirea 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, informatică, chimie și biologie • Dezvoltarea direcțiilor de interdisciplinaritate: fizică, informatică, chimie, biologie, medicină, mediu

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de	Observații
-----------------	------------------	-------------------

	predare	
Curs 1 Introducere Clasificarea metodelor; metode empirice și semiempirice; metode cuantice; tipuri de calcul; matricea Z	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 2 Teoria Hartree-Fock-Roothan Sistemul de unități atomice Hamiltonianul molecular Aproximația Born-Oppenheimer Ecuațiile Hartree,	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 3 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 Orbitalii STO și GTO; Funcții de bază și seturi de bază Analiza de populație Mulliken	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 5 Metode pentru descrierea corelării electronice correlation Metode post Hartree-Fock methods Metoda MP2 Metoda interacțiunii de configurație	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 Funcționale de schimb corelare Aproximația densității locale; Aproximația GGA	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 8 Stări moleculare excitate Teoria funcționalei de densitate dependentă de timp Calcule TD-DFT ale energiilor de excitare electronică	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator și mijloace vizuale	2 ore
Curs 9	prelegerea	2 ore

Efecte de solvent și metode de solvatare Metode continue de solvatare Metode de solvatare cu solvent explicit	combinată, se vor utiliza: tablă, calculator și mijloace vizuale	
Curs 10 Parametri termochimici Entalpia și entalpia de reacție Entropia și entropia de reacție Energia liberă Gibbs	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 11 Calculul spectrelor moleculare 1 Calculul și atribuirea spectrelor vibrationale și de absorbție electronică	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 12 Calculul spectrelor moleculare 2 Calculul și atribuirea spectrelor RMN și RES	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 13 Interacțiuni intermoleculare Calculul energiilor de interacțiune intermoleculară; Eroarea suprapunerii seturilor de bază	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 14 Interacțiuni intermoleculare slabe Metoda lui Grimme (DFT-D) Metoda potențialelor de corecție dispersivă	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Bibliografie		
<ol style="list-style-type: none"> 1. A.Szabo, N.S.Ostlund, <i>Modern Quantum Chemistry; Introduction to Advanced Electronic Structure Theory</i>, McGraw-Hill Publishing Company, New York, 1989 2. Wolfram Koch, Max C. Holthausen, <i>A Chemist's Guide to Density Functional Theory</i>, Wiley, 2001 3. D. C. Young, <i>Computational Chemistry</i>, John Wiley and Sons, 2001 4. W. Kohn, A. D. Becke, and R. G. Parr, <i>Density Functional Theory of Electronic Structure</i>, J. Phys. Chem.100, 12974-12980 (1996) 5. M. L. Senent, S. Wolson, <i>Intramolecular Basis Set Superposition Errors</i>, International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 82, 282–292 (2001) 6. Christopher J. Cramer and Donald G. Truhlar, <i>Implicit Solvation Models: Equilibria, Structure, Spectra and Dynamics</i>, Chem. Rev. 99, 2161-2200(1999) 7. Jay William Ponder, <i>TINKER - Software Tools for Molecular Design</i>, 2003 8. Martin Schutz, Steve Brdarski, Per-Olof Widmark, Roland Lindh, and Gunnar Karlstrom, <i>The water dimer interaction energy: Convergence to the basis set limit at the correlated level</i>, 		

<p>J. Chem. Phys. 107 4597-4605 (1997)</p> <p>9. P. Echenique and J.L. Alonso, <i>A mathematical and computational review of Hartree-Fock SCF methods in quantum chemistry</i> (http://arxiv.org/abs/0705.0337)</p> <p>10. D. Sherrill, <i>Quantum Chemistry-Computational Chemistry</i> (http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/)</p>		
8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
8.3 Laborator	Metode de predare	Observații
1. Specificarea geometriei moleculelor; Coordonate carteziene; Formalismul matricii Z; Optimizarea geometriilor moleculare – optimizare parțială și totală	Discutie individuală	2 ore
2. Conformerii și tautomerii; Barierea de rotație în la molecula de etan și barierea de inversie la molecula de amoniac	Discutie individuală	2 ore
3. Potențialul de ionizare și afinitatea electronica pentru o serie de molecule isoelectronice; Afinitatea protonică	Discutie individuală	2 ore
4. Moduri normale de vibrație; Calculul spectrelor IR și Raman	Discutie individuală	2 ore
5. Calculul spectrelor de rezonanță (RMN și RES); Efecte de solvent; solvatare cu modele continue și discrete	Discutie individuală	2 ore
6. Calculul energiilor de legătură pentru diferiți clusteri moleculari legați H-bond în baze DNA; Corecția BSSE; Extrapolarea CBS	Discutie individuală	2 ore
7. Calculul TD-DFT al spectrelor de absorbție electronică; Optimizarea geometriilor în stare excitată; Calculul timpilor de viață ai stărilor excitate	Discutie individuală	2 ore
Bibliografie		
<p>1. R.G.Parr, W.Yang, <i>Density Functional Theory of Atoms and Molecules</i>, Oxford University Press, New York, 1989</p> <p>2. J.A.Pople, D.L.Beveridge, <i>Approximate Molecular Orbitals Theory</i>, McGraw-Hill, New York, 1970</p> <p>3. W.J.Hehre, L.Radom, P.v.R.Schleyer, J.A.Pople, <i>Ab Initio Molecular Orbital Theory</i>, John Wiley & Sons, New York, 1986</p> <p>4. F.Jensen, <i>Introduction to Computational Chemistry</i>, John Wiley and Sons, New York, 2001</p> <p>5. T. Heine, J.O. Joswig, A. Gelessus, <i>Computational Chemistry Workbook-Learning Through Examples</i>, Wiley-VCH, 2009</p> <p>6. J. B. Foresman, A. Frisch, <i>Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods</i>, Gaussian Inc., 1996</p> <p>7. C.J. Cramer, <i>Essentials of Computational Chemistry</i>, John-Wiley and Sons, 2002</p> <p>8. V. Chiș, O. Cozar, L. David, <i>Simetrie Moleculară</i>, Ed. Napoca Star, Cluj-Napoca, 2007</p>		

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 (MIT, National Computational Science Institute, Scuola Normale Superiore di Pisa, University Calgary, University of Zurich). 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 Laborator	Activitate	Experimente realizate	50
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