

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Politehnica Timișoara
1.2 Facultatea ¹ / Departamentul ²	Chimie Industrială și Ingineria Mediului / Chimie Aplicată și Ingineria Compușilor Organici și Naturali
1.3 Domeniul de studii (denumire/cod ³)	Inginerie Chimică / 10.30.50
1.4 Ciclul de studii	Licență
1.5 Programul de studii (denumire/cod/calificarea)	Ingineria și informatica proceselor chimice și biochimice / 10.30.50.50 / expert inginer chimist

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei/Categoria formativă ⁴	Modelare Moleculară / DS						
2.2 Titularul activităților de curs	Ș.L. dr. ing. Iulia PĂUȘESCU						
2.3 Titularul activităților aplicative ⁵	Ș.L. dr. ing. Iulia PĂUȘESCU						
2.4 Anul de studii ⁶	4	2.5 Semestrul	8	2.6 Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei ⁷	DO

3. Timp total estimat - ore pe semestru: activități didactice directe (asistate integral sau asistate parțial) și activități de pregătire individuală (neasistate)⁸

3.1 Număr de ore asistate integral/săptămână	3,5 , format din:	3.2 ore curs	2	3.3 ore seminar/laborator/proiect	1,5
3.1* Număr total de ore asistate integral/sem.	49 , format din:	3.2* ore curs	28	3.3* ore seminar/laborator/proiect	21
3.4 Număr de ore asistate parțial/săptămână	, format din:	3.5 ore practică		3.6 ore elaborare proiect de diplomă	
3.4* Număr total de ore asistate parțial/semestru	, format din:	3.5* ore practică		3.6* ore elaborare proiect de diplomă	
3.7 Număr de ore activități neasistate/săptămână	7,2 , format din:	ore documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren			1,2
		ore studiu individual după manual, suport de curs, bibliografie și notițe			3
		ore pregătire seminarii/laboratoare, elaborare teme de casă și referate, portofolii și eseuri			3
3.7* Număr total de ore activități neasistate/semestru	101 , format din:	ore documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren			17
		ore studiu individual după manual, suport de curs, bibliografie și notițe			42
		ore pregătire seminarii/laboratoare, elaborare teme de casă și referate, portofolii și eseuri			42
3.8 Total ore/săptămână ⁹	10,7				
3.8* Total ore/semestru	150				
3.9 Număr de credite	6				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Chimie anorganică, Chimie Organică, Chimie fizică, matematică, fizică
4.2 de competențe	•

¹ Se înscrie numele facultății care gestionează programul de studiu căruia îi aparține disciplina.

² Se înscrie numele departamentului căruia i-a fost încredințată susținerea disciplinei și de care aparține titularul cursului.

³ Se înscrie codul prevăzut în HG – privind aprobarea Nomenclatorului domeniilor și al specializărilor/programelor de studii, actualizată anual.

⁴ Disciplina se încadrează potrivit planului de învățământ în una dintre următoarele categorii formative: disciplină fundamentală (DF), disciplină de domeniu (DD), disciplină de specialitate (DS) sau disciplina complementară (DC).

⁵ Prin activități aplicative se înțeleg activitățile de: seminar (S) / laborator (L) / proiect (P) / practică (Pr).

⁶ Anul de studii în care este prevăzută disciplina în planul de învățământ.

⁷ Disciplina poate avea unul din următoarele regimuri: disciplină impusă (DI) sau disciplină obligatorie (DOb)-pentru alte domenii fundamentale de studii oferite de UPT, disciplină opțională (DO) sau disciplină facultativă (Df).

⁸ Numărul de ore de la rubricile 3.1*, 3.2*, ..., 3.8* se obțin prin înmulțirea cu 14 (săptămâni) a numărului de ore din rubricile 3.1, 3.2, ..., 3.8. Informațiile din rubricile 3.1, 3.4 și 3.7 sunt chei de verificare folosite de ARACIS sub forma: (3.1)+(3.4) ≥ 28 ore/săpt. și (3.8) ≤ 40 ore/săpt.

⁹ Numărul total de ore / săptămână se obține prin însumarea numărului de ore de la punctele 3.1, 3.4 și 3.7.

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Sală de curs dotată cu sistem video + calculator și tablă. Este interzisă utilizarea telefoanelor mobile pentru convorbiri, mesaje sau înregistrarea activităților didactice
5.2 de desfășurare a activităților practice	<ul style="list-style-type: none"> Sală calculatoare – dotată cu sistem audio-video și tablă de scris. Calculatoare prevăzute cu software specific - Este interzisă utilizarea telefoanelor mobile pentru convorbiri, mesaje sau înregistrarea activităților didactice

6. Competențe la formarea cărora contribuie disciplina

Competențe specifice	<ul style="list-style-type: none">
Competențele profesionale în care se înscriu competențele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul științelor ingineresti Descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei, ingineriei chimice și al aplicării instrumentelor informatice moderne Exploatarea proceselor și instalațiilor cu aplicarea cunoștințelor din domeniul ingineriei chimice utilizând sistemele informatice specifice și proiectarea asistată de calculator Descrierea, analiza și utilizarea noțiunilor de structură și reactivitate ale compușilor chimici utilizând sistemele informatice specifice, precum și a bazelor de date chimice și biochimice Exploatarea asistată de calculator a echipamentelor și metodelor de analiză și caracterizare specifice produselor chimice Evaluarea metodelor și practicilor elementare de management, marketing și antreprenariat
Competențele transversale în care se înscriu competențele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Executarea sarcinilor profesionale conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit și cu îndrumare calificată Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate Înformarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare

7. Obiectivele disciplinei (asociate competențelor de la punctul 6)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> Înțelegerea conceptelor modelării și aplicarea lor la modelarea structurilor chimice. Capacitatea de a utiliza practic cunoștințele dobândite și a le corela cu cele provenite din alte discipline în vederea construirii unor modele structurale.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Înțelegerea aspectelor legate de structura moleculară și modul de cuantificare al acesteia. Există mai multe modalități de descriere a structurii: geometrică, cuantică, electronică, etc, permițând găsirea unor relații numerice între structură și proprietăți și care să explice reactivitatea chimică, proprietățile fizice, activitatea biologică, etc. Înțelegerea limitărilor metodelor computaționale. Abilitatea de a utiliza programe specifice de modelare moleculară

8. Conținuturi¹⁰

8.1 Curs	Număr de ore	Metode de predare ¹¹
Modele și modelare. Tipuri de modele aplicate în chimie	2	Expunere interactivă. Tablă de scris, sistem video proiector, calculator, legătură internet
Modelul topologic. Analiza corelațională pentru validarea modelelor	4	
Modelul geometric și mecanica moleculară. Parametri van der Waals. Optimizarea structurilor	4	
Modelul cuantic. Metode empirice și semiempirice	4	

¹⁰ Se detaliază toate activitățile didactice prevăzute prin planul de învățământ (tematicile prelegerilor și ale seminariilor, lista lucrărilor de laborator, conținuturile etapelor de elaborare a proiectelor, tematica fiecărui stagi de practică). Titlurile lucrărilor de laborator care se efectuează pe standuri vor fi însoțite de notația „(*)”.

¹¹ Prezentarea metodelor de predare va include și folosirea noilor tehnologii (e-mail, pagină personalizată de web, resurse în format electronic etc.).

Modelul cuantic. Metode <i>ab initio</i> și DFT	4	
Descriptori moleculari calculați și utilizarea lor în studiul proprietăților compusilor chimici	4	
Modele liniare de energie liberă. Ecuțiile Hammett și Taft. Aplicații în studiul reactivității și activității biologice.	6	

Bibliografie¹²

1. C.J. Cramer – Computational Chemistry, 2nd, Wiley, 2004
2. F. Jensen – Introduction to Computational Chemistry 2nd, Wiley, 2007
3. M. Medeleanu – Modelarea nanostructurilor, Ed. Politehnica Timisoara, 2013
4. R.B. Silverman – The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, Elsevier, Academic Press, 2004

8.2 Activități aplicative ¹³	Număr de ore	Metode de predare
Prezentarea pachetelor de programe: Avogadro, GAMESS, MOPAC, GAUSSIAN09, VEGA ZZ, Chemcraft, HyperChem; construcția moleculelor	3	Discuții legate de tematică, efectuarea lucrărilor, analiza rezultatelor și concluzii, teste
Optimizarea geometrică folosind mecanica moleculară și metodele cuantice semiempirice; calculul barierelor de rotație, calculul energiilor și a distribuției sarcinii pe atomi, calcularea spectrelor UV-VIS	6	
Determinarea descriptorilor moleculari prin metode cuantice și studiul reactivității chimice folosind metode semiempirice, <i>ab initio</i> și DFT	9	

Bibliografie¹⁴

1. M. Medeleanu – Modelarea nanostructurilor, Ed. Politehnica Timisoara, 2013
2. J.B. Foresman, Ae.Frisch – Exploring chemistry with electronic structure methods, Pittsburg Gaussian, 1996
3. *** - <https://www.webmo.net/support/education.html>
4. *** - <https://avogadro.cc/teaching/>

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

- Conținutul disciplinei – Modelare moleculară, este în acord cu discipline similare din țara și străinătate cât și cu așteptările asociațiilor profesionale și angajatorilor reprezentativi din domeniu.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare ¹⁵	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Cunoașterea noțiunilor fundamentale de modelare și capacitatea de aplicare practică a noțiunilor predate	Examen scris timp de 2 ore, bazat pe probleme și întrebări cu grade diferite de dificultate în vederea evaluării asimilării, modului de gândire și a capacității de corelare	0,66

¹² Cel puțin un titlu trebuie să aparțină colectivului disciplinei iar cel puțin un titlu trebuie să se refere la o lucrare de referință pentru disciplină, de circulație națională și internațională, existentă în biblioteca UPT.

¹³ Tipurile de activități aplicative sunt cele precizate în nota de subsol 5. Dacă disciplina conține mai multe tipuri de activități aplicative atunci ele se trec consecutiv în liniile tabelului de mai jos. Tipul activității se va înscrice într-o linie distinctă sub forma: „Seminar:”, „Laborator:”, „Proiect:” și/sau „Practică:”.

¹⁴ Cel puțin un titlu trebuie să aparțină colectivului disciplinei.

¹⁵ Fișele disciplinelor trebuie să conțină procedura de evaluare a disciplinei cu precizarea criteriilor, a metodelor și a formelor de evaluare, precum și cu precizarea ponderilor atribuite acestora în nota finală. Criteriile de evaluare se formulează în mod distinct pentru fiecare activitate prevăzută în planul de învățământ (curs, seminar, laborator, proiect). Ele se vor referi și la formele de verificare pe parcurs (teme de casă, referate ș.a.)

	la curs	și interpretare a rezultatelor	
10.5 Activități aplicative	S:		
	L: Capacitatea de lucru individuală, gradul de înțelegere a lucrărilor practice și abilitățile dobândite	Evaluare pe parcursul semestrului prin discuții, teme, teste	0,34
	P¹⁶:		
	Pr:		
10.6 Standard minim de performanță (se prezintă cunoștințele minim necesare pentru promovarea disciplinei și modul în care se verifică stăpânirea lor ¹⁷)			
<ul style="list-style-type: none"> • Demonstrarea cunoștințelor dobândite și modul de operare cu acestea – examen scris promovat cu minimum nota 5 • Laborator: Evaluare pe parcursul semestrului prin notare în urma discuțiilor și a testelor, inclusiv ailitatea de a opera programele de lucru existente. Nota de promovare minimă este 5 			

Data completării

10.06.2022

**Titular de curs
(semnătura)**

Ș.L. dr. ing. Iulia PĂUȘESCU

**Titular activități aplicative
(semnătura)**

Ș.L. dr. ing. IULIA PĂUȘESCU

**Director de departament
(semnătura)**

Șef lucrări dr.ing. Andra TĂMAȘ

Data avizării în Consiliul Facultății¹⁸

14.12.2022

**Decan
(semnătura)**

Conf.dr.ing. Mihai MEDELEANU

¹⁶ În cazul când proiectul nu este o disciplină distinctă, în această rubrică se va preciza și modul în care rezultatul evaluării proiectului condiționează admiterea studentului la evaluarea finală din cadrul disciplinei.

¹⁷ Nu se va explica cum se acorda nota de promovare.

¹⁸ Avizarea este precedată de discutarea punctului de vedere al board-ului de care aparține programul de studii cu privire la fișa disciplinei.