

**FIȘA DISCIPLINEI****1. Date despre program**

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași
1.2 Facultatea	Facultatea de Chimie
1.3 Departamentul	DEPARTAMENTUL DE CHIMIE
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclu de studii	Masterat
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimie clinică

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei			Modelare și spectroscopie moleculară					
2.2 Titularul activităților de curs			Conf. Dr. IONEL HUMELNICU					
2.3 Titularul activităților de laborator			Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU					
2.4 An de studiu	II	2.5 Semestrul	IV	2.6 Tip de evaluare*	E	2.7 Regimul disciplinei**	Op	

*E – Examen / C – Colocviu / V – Verificare

**OB – Obligatoriu / OP – Opțional / F – Facultativ

3. Timpul total estimat (ore pe semestru și activități didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	48	3.5 curs	24	3.6 seminar/laborator	24
Distribuția fondului de timp					ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și altele					40
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					30
Pregătire seminare/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					15
Tutoriat					10
Examinări					7
Alte activități					0
3.7 Total ore studiu individual*					102
3.8 Total ore pe semestru					150
3.9 Numărul de credite					6

4. Precondiții - De curriculum (dacă este cazul)

Chimie anorganică avansată, Chimie organică avansată, Relații structură activitate

5. Condiții (dacă este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	sala dotata cu echipament multimedia
5.2 De desfășurare a laboratorului	sală dotată cu aparatură și tehnică de calcul

6. Obiective

Înșușirea bazelor și principiilor de modelare ale structurii moleculare și utilizarea metodelor chimiei teoretice în investigarea proprietăților moleculare. Explicarea și interpretarea proprietăților, conceptelor, teoriilor și modelelor fundamentale care caracterizează structurile moleculare și reactivitatea lor.

La finalizarea cu succes a acestei discipline, studenții vor fi capabili să:

- Explice structura spațială și proprietățile fizico-chimice ale sistemelor moleculare.
- Descrie metodele și teoriile de studiu utilizate pentru determinarea și analiza structurii spațiale a sistemelor moleculare.
- Aplice tehnici de calcul și programe specifice de modelare moleculară pentru optimizarea geometriei, analiza conformațională și studiul proprietăților structurale ale sistemelor moleculare.
- Analizeze și interpreteze rezultatele obținute utilizând programe de calcul dedicate modelării moleculare.
- Calculeze diferite mărimi structurale, energetice și de reactivitate pe baza rezultatelor investigațiilor teoretice și computaționale.

7. Competențe/Rezultate ale învățării

- Descrierea, explicarea și interpretarea metodelor, tehnicilor și conceptelor chimice utilizate în analiza clinică.
- Utilizarea corectă și corelată într-un domeniu interdisciplinar a cunoștințelor, metodelor și tehnicilor specifice analizei chimice, biochimice, fizico-chimice.
- Cunoașterea proprietăților și operarea cu noțiuni specifice de structură și reactivitate a tuturor compușilor utilizați în analizele de laborator.
- Realizarea și elaborarea unor rapoarte de analize profesionale și proiecte de cercetare, articole sau studii științifice, respectând legislația în domeniu, termenele, obiectivele și normele de etică profesională.

8. Conținut

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Metode de modelare a geometriei moleculare - Concepte generale privind modelarea moleculară. - Sisteme de coordonate utilizate în descrierea structurilor moleculare. Metode ale mecanicii moleculare de investigare a sistemelor moleculare. - Funcția de energie potențială conformațională.	prelegerea, conversația, explicația	2
- Modelarea moleculară prin componentele câmpului de forțe.	prelegerea, conversația, explicația	2
- Modelarea moleculară utilizând potențiale de nelegătură și mixte.	prelegerea, conversația, explicația	2
Elemente fundamentale și metode de investigare, modelare ale chimiei cuantice	prelegerea, conversația, explicația	2
Elemente fundamentale și metode de modelare în chimia cuantică	prelegerea, conversația, explicația	2
Metode de investigare calitativă a legăturii chimice.	prelegerea, conversația, explicația	2
Spinul electronic în metodele de modelare a legăturii chimice și structurii moleculare.	prelegerea, conversația, explicația	2
Aproximații, tipuri de funcții orbitale și baze de orbitale utilizate în modelarea moleculară.	prelegerea, conversația, explicația	2
Geometria moleculară și analiza suprafeței de energie potențială - Determinarea și interpretarea parametrilor geometrici. - Minime, stări de tranziție și căi de reacție pe suprafața de energie potențială. - Corelarea energiei potențiale cu stabilitatea și reactivitatea sistemelor moleculare.	prelegerea, conversația, explicația	2

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Modelarea reacției chimice și studiul reactivității - Teorii calitative ale reactivității chimice. - Studiul reactivității chimice în regim static. - Investigarea reactivității în regim dinamic. - Descriptori energetici și de reactivitate în interpretarea comportamentului molecular.	prelegerea, conversația, explicația	2
Utilizarea metodelor chimiei teoretice în determinarea proprietăților electronice, de reactivitate și spectroscopice ale sistemelor moleculare. - Interpretarea spectrelor vibraționale, electronice și NMR prin modelare teoretică.	prelegerea, conversația, explicația	2
Interacțiunile intermoleculare și structura moleculelor specifice unor sisteme de interes chimic.	prelegerea, conversația, explicația	2

Bibliografie

1. C.J. Cramer, Essential of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Edition, John Wiley & Sons Ltd, T, Chichester, 2004
2. A. Hinchliffe, Modelling Molecular Structures, John Wiley & Sons, New York, 1996
3. J.B. Foresman, Aileen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods - second edition, Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1996
4. T. Schlick, Molecular Modeling and Simulation, 2nd edition, Springer, New York, 2010
5. K.I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori, Computational Chemistry and Molecular Modeling. Principles and Applications, Springer, Berlin, 2008
6. A. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, 2nd Edition, Prentice Hall; 2 edition, 2001
7. H.-D. Höltje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, Molecular Modeling: Basic Principles and Applications, 3rd Edition, Wiley-VCH 2008
8. W. Koch, M.C. Holthausen, A chemist's guide to density functional theory, Wiley-VCH, 2000
9. I. Humelnicu, Elemente de chimie teoretică, Editura Tehnopress, Iași, 2003
10. C. Stan Tsai, An Introduction to Computational Biochemistry, John Wiley & Sons, New York, 2002
11. K. Gundertofte, F. S. Jørgensen, (Eds.), Molecular Modeling and Prediction of Bioactivity, Kluwer Academic-Plenum Publishers, New York, 2000
12. E.G. Lewars, Computational Chemistry (4th ed.). Cham: Springer, 2024

8.2 Seminar / Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Sisteme de coordonate utilizate în modelarea moleculară - Coordonate carteziene, interne și alte sisteme relevante. - Importanța alegerii sistemului de coordonate în optimizarea geometriei.	Explicația, studiu de caz, conversația, demonstrația	2
Construirea și vizualizarea structurilor moleculare - Generarea și manipularea structurilor 2D și 3D. - Reprezentarea moleculelor în diferite sisteme de coordonate.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Utilizarea matricei Z pentru descrierea internă, construcția sistemelor moleculare.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Modelarea geometriei moleculare și caracterizarea energetică - Optimizarea geometriei moleculare. - Determinarea energiilor relative și a stabilității conformaționale.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Utilizarea diferitelor metode în modelarea sistemelor moleculare - Metode de mecanică moleculară, semiempirice și cuantice.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Compararea rezultatelor obținute prin metode diferite pentru aceleași sisteme moleculare.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Calculul indicilor de reactivitate - Aproximația statică și dinamică. - Determinarea descriptorilor de reactivitate (Fukui, electronegativitate, duritate).	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Corelarea metodelor de modelare moleculară cu proprietățile structurale - Analiza legăturii între structura optimizată și proprietățile chimice și fizice ale moleculei.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Studiul reacțiilor chimice utilizând suprafața de energie potențială - Identificarea structurilor intermediare și a stărilor de tranziție.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2

8.2 Seminar / Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
- Analiza profilului energetic al reacțiilor chimice și determinarea căilor preferențiale.		
Investigații teoretice asupra mecanismului de reacție - Evaluarea etapelor reacției și a energiilor de activare.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Modelarea moleculară: proprietăți și tipuri de baze de orbitale - Alegerea bazelor în funcție de sistem și nivel de teorie. - Influența tipului de bază asupra rezultatelor energetice și geometrice.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Determinarea proprietăților moleculare utilizând diferite programe de calcul - Aplicarea unor software-urilor specializate pentru calculul proprietăților structurale, energetice, electronice și spectroscopice.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2

Bibliografie

1. A. Rappe, C. Casewit, Molecular Mechanics across Chemistry, University Science Books, Sausalito, California, 1997
2. K.I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori, Computational Chemistry and Molecular Modeling. Principles and Applications, Springer, Berlin, 2008
3. A. Hinchliffe, Modelling Molecular Structures, John Wiley & Sons, New York, 1996
4. J.B. Foresman, Æleen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods - second edition, Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1996
5. C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Edition, John Wiley & Sons Ltd, T, Chichester, 2004
6. W. Koch, M.C. Holthausen, A chemist's guide to density functional theory, 2nd Ed, Wiley-VCH, 2001

9. Coroborarea conținutului disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității, asociațiilor profesionale și angajatorilor reprezentativi din domeniul aferent programului

Conținutul cursului și al aplicațiilor de laborator sunt în concordanță cu cerințele asociațiilor profesionale naționale și internaționale de specialitate

10. Evaluare

10.1 Evaluare continuă		Pondere (min. 30%)	50	
Curs	Forma de evaluare			
	Pondere		0	
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale			
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare
Laborator	Forma de evaluare		Verificare mixtă	
	Pondere		100	
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da	
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare
		Verificare practică periodică	50	Da
		Studiu de caz	50	Da

10.2 Evaluare finală	Pondere (max. 70%)	50
	Forma de evaluare	Verificare scrisă finală

10.3 Mențiuni (situații speciale în evaluare)

Pentru studenții aflați în mobilitate internațională, evaluarea va fi efectuată în conformitate cu prevederile specifice

10.4 Standard minim de performanță

La finalizarea disciplinei, studentul trebuie să demonstreze:

- Scrierea expresiei și explicarea componentelor potențialului câmpului de forțe utilizat în metodele de mecanică moleculară.
- Cunoașterea principalelor aproximații aplicate în metodele semiempirice de calcul al sistemelor moleculare.
- Efectuarea calculelor pentru determinarea parametrilor structurali, energetici și de reactivitate care caracterizează un sistem molecular.

**Data completării,
29.09.2025**

**Titular de curs,
Conf. Dr. IONEL HUMELNICU**

**Titular de laborator,
Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU**

Data avizării în departament,

**Director de departament,
Prof. Dr. MIHAIL LUCIAN BIRSA**