

**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	Chimia produselor cosmetice și farmaceutice

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Modelare 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	Sală curs dotată cu echipament multimedia
5.2 De desfășurare a seminarului/ laboratorului	- sală dotată cu aparatură și tehnică de calcul

6. Obiective

Înșușirea bazelor teoretice și a principiilor de modelare a structurii moleculare, precum și utilizarea metodelor chimiei teoretice în investigarea proprietăților moleculare. Explicarea și interpretarea principalelor proprietăți, concepte, teorii, modele și noțiuni fundamentale de structură și reactivitate care caracterizează sistemele moleculare.

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

- Explice structura spațială și proprietățile sistemelor moleculare.
- Descrie principalele metode și teorii utilizate pentru determinarea structurii spațiale a sistemelor moleculare.
- Utilizeze 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 prin utilizarea programelor de calcul dedicate modelării moleculare.
- Calculeze diferite mărimi structurale, energetice și de reactivitate pe baza rezultatelor investigațiilor teoretice.

7. Competențe/Rezultate ale învățării

- Capacitatea de analiză, sinteză și utilizare a metodelor științifice riguroase și a tuturor resurselor de informație în orice context profesional și social.
- Utilizarea adecvată a cunoștințelor, deprinderilor și abilităților practice de muncă în laborator.
- Abilități de muncă individuală și în echipă, cu planificarea activității și managementul timpului.
- Cunoașterea și operarea cu noțiuni specifice de structură, proprietăți și reactivitate a compușilor chimici, farmaceutici și cosmetici.
- Diversificarea formelor și stilurilor de învățare.

8. Conținut

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Metode de modelare a geometriei moleculare - Principii generale și scopuri ale modelării geometriei moleculare. - Reprezentarea și optimizarea geometriei moleculare: coordonate interne și carteziane, parametri structurali (lungimi de legătură, unghiuri și torsiuni). Metode ale mecanicii moleculare de investigare a sistemelor moleculare - Fundamentele mecanicii moleculare.	prelegerea, conversația, explicația	2
- Funcția de energie potențială conformațională. - Modelarea moleculară prin componentele câmpului de forțe.	prelegerea, conversația, explicația	2
- Modelarea moleculară utilizând potențiale de nelegătură și potențiale mixte.	prelegerea, conversația, explicația	2
Elemente fundamentale și metode de modelare, investigare ale Chimiei cuantice. Modele cuantice fundamentale și aplicabilitatea lor în descrierea sistemelor moleculare.	prelegerea, conversația, explicația	2
Modelarea legăturii chimice. Conceptele teoretice ale legăturii chimice.	prelegerea, conversația, explicația	2
Metode calitative de investigare a legăturii chimice.	prelegerea, conversația, explicația	2
Rolul spinului electronic în modelarea legăturii chimice și a structurii moleculare.	prelegerea, conversația, explicația	2
Funcții orbitale și baze de orbitale utilizate în modelarea moleculară Tipuri de aproximații și funcții orbitale. Baze de orbitale utilizate în calculele cuantice.	prelegerea, conversația, explicația	2
Geometria moleculară și analiza suprafeței de energie potențială Optimizarea geometriei moleculare. Relația dintre configurația moleculară și stabilitate energetică.	prelegerea, conversația, explicația	2

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Modelarea reacției chimice. Teorii calitative ale reactivității chimice Studiul reactivității chimice în regim static. Investigarea reactivității chimice în regim dinamic.	prelegerea, conversația, explicația	2
Aplicarea metodelor chimiei teoretice în determinarea proprietăților moleculare - Determinarea proprietăților electronice, de reactivitate și spectroscopice.	prelegerea, conversația, explicația	2
Interacțiuni intermoleculare și structura moleculelor specifice anumitor sisteme de interes chimic.	prelegerea, conversația, explicația	2

Bibliografie

- C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Edition, John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 2004.
- A. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, 2nd Edition, Prentice Hall, 2001.
- T. Schlick, Molecular Modeling and Simulation, 2nd Edition, Springer, New York, 2010.
- F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry (ediția a 3-a). Chichester: Wiley 2020.
- W. Koch, M.C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley-VCH, Weinheim, 2000.
- E. G Lewars, Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics (ediția a 4-a). Cham: Springer. 2024.
- I. Humelnicu, Elemente de chimie teoretică, Editura Tehnopress, Iași, 2003.
- A. Hinchliffe, Modelling Molecular Structures, John Wiley & Sons, New York, 1996.
- J.B. Foresman, Æleen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 2nd Edition, Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1996.
- K.I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori, Computational Chemistry and Molecular Modeling: Principles and Applications, Springer, Berlin, 2008.
- H.-D. Höltje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, Molecular Modeling: Basic Principles and Applications, 3rd Edition, Wiley-VCH, 2008.
- C. Stan Tsai, An Introduction to Computational Biochemistry, John Wiley & Sons, New York, 2002.
- K. Gundertofte, F.S. Jørgensen (Eds.), Molecular Modeling and Prediction of Bioactivity, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 2000.

8.2 Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Sisteme de coordonate utilizate în modelarea moleculară. Tipuri de coordonate (carteziene, interne, sferice). Reprezentarea poziției atomilor într-o moleculă.	Explicația, studiu de caz, conversația, demonstrația	2
Construirea și vizualizarea structurilor moleculare în diferite sisteme de coordonate. Utilizarea programelor de modelare moleculară pentru generarea și manipularea structurilor 2D și 3D.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Matricea Z – descriere internă a geometriei moleculare. Definirea și utilizarea coordonatelor interne (lungimi de legătură, unghiuri, dihedrale).	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Modelarea geometriei moleculare și caracterizarea energetică a structurilor. Optimizarea geometriei moleculare prin metode clasice și cuantice. Analiza energiei potențiale.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Utilizarea diferitelor metode teoretice în modelarea structurilor moleculare reactante. Compararea metodelor semiempirice, ab initio și DFT în studiul structurilor chimice.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Compararea rezultatelor obținute prin diferite metode ale chimiei teoretice. Analiza variațiilor geometrice, energetice și electronice în funcție de nivelul de teorie și baza de orbitale utilizată.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Calculul indicilor de reactivitate în aproximația statică și dinamică. Determinarea densității electronice, potențialului electrostatic molecular, indicilor Fukui, durității și electronegativității.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Modelarea moleculară reflectată în proprietățile moleculare. Corelarea proprietăților calculate (dipol, momente de cuadropol, HOMO-LUMO, polarizabilitate) cu structura moleculară.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2

8.2 Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Studiul reacției chimice utilizând suprafața de energie potențială. Determinarea punctelor de tranziție, a complexelor de reacție și a căilor minime de energie.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Investigații teoretice asupra mecanismului de reacție. Analiza profilului energetic al reacției. Identificarea stărilor intermediare și a barierelor de activare.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Modelarea moleculară, proprietăți și tipuri de baze de orbitale. Alegerea bazelor în funcție de sistemul studiat. Influența lor asupra preciziei rezultatelor.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2
Determinarea proprietăților moleculare utilizând diferite metode și programe de calcul. Aplicarea diferitelor pachete software pentru determinarea proprietăților structurale, energetice și spectroscopice.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	2

Bibliografie

- A. Rappe, C. Casewit, Molecular Mechanics across Chemistry, University Science Books, Sausalito, California, 1997.
- K.I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori, Computational Chemistry and Molecular Modeling. Principles and Applications, Springer, Berlin, 2008.
- A. Hinchliffe, Modelling Molecular Structures, John Wiley & Sons, New York, 1996.
- J.B. Foresman, Æleen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 2nd Edition, Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1996.
- C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Edition, John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 2004.
- W. Koch, M.C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2nd Edition, Wiley-VCH, 2001.
- D.C. Young, Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems. New York: Wiley. 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 este aliniat cerințelor asociațiilor profesionale naționale și internaționale, fiind în concordanță cu așteptările comunității, ale asociațiilor profesionale și ale angajatorilor relevanți din domeniul programului

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:

- Capacitatea de scriere și explicare a expresiei potențialului câmpului de forțe, precum și înțelegerea rolului componentelor sale în cadrul metodelor de mecanică moleculară;
- Cunoașterea principalelor aproximații utilizate în metodele semiempirice de calcul al structurii și energiei sistemelor moleculare;
- Abilitatea de a efectua calcule pentru determinarea parametrilor structurali, energetici și de reactivitate care caracterizează un sistem molecular;
- Interpretarea rezultatelor obținute în corelație cu modelul teoretic utilizat.

**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**