

**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	Licență
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimie

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei			Chimie computațională și termodinamică statistică					
2.2 Titularul activităților de curs			Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU/ Lect. Dr. MIHAI DUMITRAS					
2.3 Titularul activităților de seminar			Conf. Dr. IONEL HUMELNICU/ Lect. Dr. MIHAI DUMITRAS					
2.4 An de studiu	III	2.5 Semestrul	VI	2.6 Tip de evaluare*	EVP	2.7 Regimul disciplinei**	Op	

*E – Examen / C – Colocviu / EVP – Evaluare pe parcurs

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

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	4.5	3.2 curs	2.5	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	54	3.5 curs	30	3.6 seminar/laborator	24
Distribuția fondului de timp					ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și altele					50
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminare/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					16
Tutoriat					2
Examinări					8
Alte activități					0

3.7 Total ore studiu individual*	96
3.8 Total ore pe semestru	150
3.9 Numărul de credite	6

4. Precondiții - De curriculum (dacă este cazul)

Termodinamică chimică; Cinetică chimică; Chimie cuantică
--

5. Condiții (dacă este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	Sală de curs dotată cu videoproiector, conexiune la internet
5.2 De desfășurare a seminarului/ laboratorului	Prezența este obligatorie

6. Obiective

Obiectivul general:

Înșușirea elementelor de bază ale chimiei computaționale și termodinamicii statistice. Rezolvarea de aplicații numerice și familiarizarea studenților cu metode reprezentative ale chimiei computaționale și termodinamicii statistice.

Obiectivele specifice:

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

- 1) Descrie și analizeze, din punctul de vedere al chimiei computaționale și termodinamicii statistice sistemele chimice
- 2) Explice și aplice principalele metode utilizate de chimia computațională și termodinamica statistică

7. Competențe/Rezultate ale învățării

- Operarea cu noțiuni de structură și reactivitate a compușilor chimici.
- Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a unor compuși chimici.
- Efectuarea de experimente, aplicarea riguroasă a metodelor de analiză și interpretarea rezultatelor, cu respectarea normelor de securitate și sănătate în muncă.
- Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul chimiei.
- Urmărirea, adaptarea și controlul proceselor chimice și fizico-chimice în laborator.

8. Conținut

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Distribuția Maxwelliană a vitezelor moleculare	Prelegere, conversație, explicație	3
Distribuția Boltzmann a moleculelor după energii	Prelegere, conversație, explicație	2
Legile gazelor ideale în perspectivă molecular-cinetică	Prelegere, conversație, explicație	2
Calculul numărului de molecule active	Prelegere, conversație, explicație	2
Ciocniri. Viteză de reacție	Prelegere, conversație, explicație	2
Teoria complexului activat	Prelegere, conversație, explicație	4
Coordonate ale structurii moleculare și ale reacțiilor chimice. Suprafețe de energie potențială (SEP) și topologia acestora. Introducere în metodele de investigare utilizate în chimia computațională	Prelegere, conversație, explicație	2
Metode de chimie computațională. Utilizarea acestora pentru investigarea structurii geometrice, a structurii electronice și a reactivității sistemelor moleculare	Prelegere, conversație, explicație	4
Optimizarea conformațională și energetică a sistemelor moleculare. Tehnici și metode de optimizare a geometriei și a energiei moleculelor și complexelor moleculare	Prelegere, conversație, explicație	2
Determinarea descriptorilor termodinamici și de reactivitate chimică	Prelegere, conversație, explicație	3
Metode semiempirice de calcul în chimia computațională. Modelarea computațională a macromoleculelor	Prelegere, conversație, explicație	2

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Elemente de mecanica și dinamica moleculară. Energia conformatională și câmpuri de forțe.	Prelegere, conversație, explicație	2

Bibliografie

- 1) A. Onu, M.O. Apostu, Chimia fizică a stărilor de agregare, MatrixROM, București, 2004.
- 2) E. Lewars, Computational Chemistry, Kluwer Academic Publishers, NY, 2004.
- 3) F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, Chichester, 1999.
- 4) D.W. Rogers, Computational Chemistry Using the PC, Third Edition, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, 2003.
- 5) C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Edition, John Wiley & Sons Ltd, T, Chichester, 2004.
- 6) D.A. McQuarrie, Molecular Thermodynamics, University Science Books, Sausalito, CA, 1999.
- 7) D.A. McQuarrie, J. D. Simon, Physical Chemistry – A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, CA, 1997.
- 8) W. Koch, M.C. Holthausen, A chemist's guide to density functional theory, Second Edition, Wiley-VCH Verlag GmbH, 2001
- 9) J. Gasteiger, T. Engel, Chemoinformatics, Wiley, Weinheim, 2003.
- 10) I. Humelnicu, Elemente de chimie teoretică, Ed. Tehnopress, Iași, 2003

8.2 Seminar / Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Aplicații de calcul în termodinamica statistică	Explicația, studiu de caz, conversația	6
Aplicații numerice în termodinamica statistică	Explicația, studiu de caz, conversația	6
Reprezentarea structurilor moleculare utilizând sistemul de coordonate interne. Construcția și manipularea structurilor moleculare utilizând programele Jmol și GaussView	Explicația, studiu de caz, conversația	3
Determinarea geometriilor moleculare de echilibru utilizând metode de chimie computațională precum MP2 și DFT.	Explicația, studiu de caz, conversația	3
Modelarea computațională a spectrelor de absorbție electronică și în IR	Explicația, studiu de caz, conversația	2
Investigarea sistemelor moleculare utilizând metode semi-empirice ale chimiei cuantice	Explicația, studiu de caz, conversația	2
Modelarea suprafețelor de potențial și determinarea structurilor moleculare cheie implicate în căile de reacție	Explicația, studiu de caz, conversația	2

Bibliografie

- 1) A. Onu, M. O. Apostu, Chimia fizică a stărilor de agregare, MatrixROM, București, 2004.
- 2) P. Atkins, J. dePaula, Physical Chemistry, 9th ed., W. H. Freeman, NY, 2010.
- 3) C. A. Trapp, M. P. Cady, C. Giunta, Instructor's solution manual to accompany Atkins' Physical Chemistry, 9th ed., W. H. Freeman, NY, 2010.
- 4) J. B. Foresman, Æleen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods - 2nd ed., Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, 1996
- 5) D.W. Rogers, Computational Chemistry Using the PC, Wiley, Hoboken, NJ, 2003.

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

Disciplina “Chimie computațională și Termodinamică statistică” oferă studenților cunoștințe și deprinderi esențiale în domeniul din care face parte, iar conținutul cursului și al aplicațiilor de laborator sunt în concordanță cu cererile asociațiilor profesionale naționale și internaționale de specialitate.

10. Evaluare

10.1 Evaluare continuă		Pondere (min. 30%)	100
Curs	Forma de evaluare		Verificare scrisă
	Pondere		50
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da

	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare
		Verificare scrisă periodică	50	Da
		Verificare orală periodică	25	Da
		Test	25	Da
Seminar / Laborator	Forma de evaluare		Verificare practică	
	Pondere		50	
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da	
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare
		Verificare practică periodică	50	Da
		Test	25	Da
		Portofoliu	25	Da

10.2 Mențiuni (situații speciale în evaluare)

--	--

10.3 Standard minim de performanță

Cunoașterea la nivel de bază a principalelor concepte și metode utilizate în domeniul chimiei fizice precum și capacitatea de a efectua lucrări de laborator, de a interpreta datele experimentale și de a rezolva probleme. Pentru promovare nota minimă la fiecare evaluare este 5.

**Data
completării,
29.09.2005**

**Titular de curs,
Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU/ Lect.
Dr. MIHAI DUMITRAS**

**Titular de seminar,
Conf. Dr. IONEL HUMELNICU/ Lect. Dr.
MIHAI DUMITRAS**

Data avizării în departament,

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