

**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 laborator			Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU/ Lect. Dr. MIHAI DUMITRAS					
2.4 An de studiu	III	2.5 Semestrul	VI	2.6 Tip de evaluare*	V	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	4.5	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	Cursul se va desfășura on site în cadrul Facultății de Chimie. Sală de curs dotată cu videoproiector sau ecran digital, conexiune la internet și tablă de scris. Se va stimula participarea interactivă. Studentii vor utiliza telefonul mobil doar pentru activitățile din cadrul cursului. Studentii sunt încurajați să aducă laptop sau tabletă proprie pentru notițe în cadrul cursului.
5.2 De desfășurare a laboratorului	Prezența este obligatorie; nu se acceptă întârzierea; recuperarea absențelor se face prin modalitatea agreată de titularul laboratorului și conform regulamentului facultății. Utilizarea telefonului mobil este permisă doar pentru activitățile din cadrul laboratorului. La lucrările practice de laborator, echipamentele de protecție indicate de titularul laboratorului (halat, ochelari de protecție și/sau mănuși) sunt obligatorii. Studentii pot utiliza laptopurile proprii pentru îndeplinirea sarcinilor de laborator, în cazul în care nu optează pentru calculatoarele puse la dispoziție de facultate.

6. Competențe

6.1 Competențele dobândite în urma absolvirii programului de studii	
Competențe Profesionale	
Codul competenței	Competență
CP7	Aplică metode științifice – Aplică metode și tehnici științifice pentru investigarea fenomenelor, dobândind noi cunoștințe sau corectând și integrând cunoștințele anterioare.
CP11	Efectuează cercetare științifică – Se angajează în conceperea sau crearea de noi cunoștințe, de noi procese, metode și sisteme prin cercetarea, îmbunătățirea sau dezvoltarea de concepte, modele, tehnici, instrumente, software sau metode operaționale.
CP14	Gândește în mod abstract – Demonstrează capacitatea de a utiliza concepte pentru a crea și înțelege generalizările și de a le corela sau conecta la alte elemente, evenimente sau experiențe.
CP16	Întocmește rapoarte de lucru – Întocmește rapoarte de lucru care sprijină gestionarea eficace a relațiilor, documentării și evidențelor conform unor standarde înalte. Întocmește și prezintă rezultate și concluzii într-un mod clar și inteligibil, ca să poată fi înțelese de nespecialiști.
Competențe Transversale	
CT1	Dă dovadă de inițiativă – Este proactiv și face primul pas într-o acțiune fără a aștepta să afle ce spun sau fac ceilalți.
CT3	Gândește analitic – Gândește folosind logica și raționamentul pentru a identifica punctele tari și punctele slabe ale soluțiilor alternative, concluziilor sau abordărilor problemelor.
CT5	Respectă angajamente – Îndeplinește sarcini în mod autodisciplinat, fiabil și cu orientare spre obiective.

7. Rezultatele învățării

7.1 Rezultatele învățării vizate prin disciplină, specifice programului de studii			
Codul competenței	Cunoștințe	Aptitudini	Responsabilitate și autonomie
CP14	Studentul/absolventul identifică și definește/explică concepte fundamentale de chimie (generală, anorganică, organică, analitică și chimie fizică) folosite în literatura de specialitate.	Studentul/absolventul analizează și evaluează corect noțiunile fundamentale din domeniul chimiei, aplică teoriile și conceptele fundamentale pentru redarea și interpretarea caracteristicilor sistemelor chimice.	Studentul/absolventul utilizează corect teoriile și principiile fundamentale ale chimiei în context didactic și în laborator.
CP7, CP11, CT3, CT5	Studentul/absolventul recunoaște și reproduce concepte științifice din ramurile chimiei anorganice, organice, analitice și chimiei fizice.	Studentul/absolventul aplică conceptele majore din domeniul chimiei analitice, anorganice, organice, chimiei fizice, biochimiei,	Studentul/absolventul adaptează conceptele științifice majore din domeniul chimiei pentru a efectua cercetări, a îmbunătăți sau dezvolta noi concepte, cunoștințe, teorii și

		chimiei materialelor în practica chimică.	metode operaționale, produse și servicii pentru a le aplica în activitățile specifice pentru controlul calității produselor și proceselor.
CP16, CT1	Studentul/absolventul identifică și utilizează metodele adecvate de informare/ documentare necesare înțelegerii și transmiterii cunoștințelor din domeniul chimie, într-o manieră științifică spre cei interesați.	Studentul/absolventul interpretează responsabil rezultatele documentării în vederea comunicării acestora către cei interesați (elevi, studenți, alte categorii socio-economice).	Studentul/absolventul selectează cele mai adecvate rezultate ale informării/documentării și le transmite clar și concis celor interesați.

7.2 Rezultatele învățării specifice disciplinei

Cunoștințe	Aptitudini	Responsabilitate și autonomie
- Studentul descrie conceptele teoretice fundamentale de termodinamică statistică și chimie computațională, relevante pentru activitatea de cercetare și analiză în laboratoare de chimie fizică și industria chimică. - Studentul definește conceptele fundamentale privind distribuțiile moleculare (Maxwell, Boltzmann) și teoria complexului activat, necesare interpretării mecanismelor de reacție în cercetarea de chimie fizică și computațională. - Studentul descrie structura sistemelor moleculare prin corelarea geometriei de echilibru cu suprafețele de energie potențială obținute prin metode de calcul de chimie computațională (HF, DFT), relevante pentru activități de modelare moleculară în laboratoare de cercetare și industria de cercetare-dezvoltare farmaceutică/chimică. - Studentul enumeră sursele și metodele adecvate de documentare științifică, necesare redactării rapoartelor și portofoliilor de laborator în activitatea de cercetare computațională și experimentală.	- Studentul aplică conceptele majore din chimia computațională pentru reprezentarea, construirea și manipularea structurilor chimice, utilizând programe dedicate (Jmol, GaussView, Chemcraft, Chimera USCF), relevante pentru activitatea de modelare moleculară din laboratoare de cercetare și industria chimică/farmaceutică. - Studentul analizează parametrii fizico-chimici, descriptorii termodinamici și spectrele de absorbție (IR, electronice) obținute prin modelare in-silico, necesare caracterizării sistemelor moleculare în activități de cercetare experimentală și teoretică. - Studentul interpretează rezultatele modelărilor și calculelor teoretice, în vederea redactării referatelor și rapoartelor științifice specifice activității de cercetare în chimie.	- Studentul dovedește inițiativă și acționează autonom, aplicând gândirea critică, logică și abstractă în analiza reactivității compușilor chimici și în rezolvarea aplicațiilor numerice, aplicând gândirea critică, logică și abstractă specifică activităților de cercetare și modelare computaționale în domeniul chimiei. - Studentul își asumă responsabilitatea pentru rigoarea și corectitudinea modelelor computaționale construite și pentru calitatea redactării portofoliului practic, în conformitate cu standardele de raportare științifică din activitatea de cercetare experimentală și teoretică.

8. Conținut

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Distribuția Maxwelliană a vitezelor moleculare	Prelegere, conversație, explicație	3 ore; [8, 9]
Distribuția Boltzmann a moleculelor după energii	Prelegere, conversație, explicație	2 ore; [8, 9]
Legile gazelor ideale în perspectivă molecular-cinetică	Prelegere, conversație, explicație	2 ore; [1, 8, 9]
Calculul numărului de molecule active	Prelegere, conversație, explicație	2 ore; [8, 9]
Ciocniri. Viteză de reacție	Prelegere, conversație, explicație	2 ore; [4, 9]
Teoria complexului activat	Prelegere, conversație, explicație	4 ore; [4, 9]
Coordonate ale structurii moleculare și ale reacțiilor chimice. Suprafețe de energie potențială (SEP) și topologia acestora.	Prelegere, conversație, explicație	2 ore; [2, 4, 7]

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Introducere în metodele de investigare utilizate în chimia computațională		
Metode de chimie computațională. Utilizarea acestora pentru investigarea structurii geometrice, a structurii electronice și a reactivității sistemelor moleculare	Prelegere, conversație, explicație	4; [2, 3, 4, 5, 7, 10]
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; [2, 4, 5, 7, 10]
Determinarea descriptorilor termodinamici și de reactivitate chimică	Prelegere, conversație, explicație	3; [2, 4, 5, 7, 10]
Metode semiempirice de calcul în chimia computațională. Modelarea computațională a macromoleculelor	Prelegere, conversație, explicație	2; [2, 4, 7]
Elemente de mecanica și dinamica moleculară. Energia conformațională și câmpuri de forțe.	Prelegere, conversație, explicație	2; [2, 4, 7]

Bibliografie

- 1) A. Onu, M.O. Apostu, Chimia fizică a stărilor de agregare, MatrixROM, București, **2004**.
- 2) A. Lupan, A. M. V. Brânzaniuc, R. Silaghi-Dumitrescu, Elemente de chimie computațională, Presa Universitară Clujeană, Universitatea Babeș-Bolyai, **2024**.
- 3) J. Autschbach, Quantum Theory for Chemical Applications, Oxford University Press, New York, **2020**.
- 4) E. Lewars, Computational Chemistry, Kluwer Academic Publishers, NY, **2004**.
- 5) M. Bursch, J.-M. Mewes, A. Hansen, S. Grimme, Best-Practice DFT Protocols for Basic Molecular Computational Chemistry, Angewandte Chemie, vol. 134, issue 42, e202205735, **2022**.
- 7) C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Edition, John Wiley & Sons Ltd, T, Chichester, **2004**.
- 8) D.A. McQuarrie, Molecular Thermodynamics, University Science Books, Sausalito, CA, **1999**.
- 9) D.A. McQuarrie, J. D. Simon, Physical Chemistry – A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, CA, **1997**.
- 10) W. Koch, M.C. Holthausen, A chemist's guide to density functional theory, Second Edition, Wiley-VCH Verlag GmbH, **2001**.

8.2 Seminar / Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Aplicații de calcul în termodinamica statistică	Explicația, studiu de caz, conversația	6 ore; [3, 4, 5]
Aplicații numerice în termodinamica statistică	Explicația, studiu de caz, conversația	6 ore; [3, 4, 5]
Reprezentarea structurilor moleculare utilizând sistemul de coordonate interne. Construcția și manipularea structurilor moleculare utilizând programele Jmol și GaussView	Explicația, studiu de caz, conversația	3 ore; [1, 6, 7]
Determinarea geometriilor moleculare de echilibru utilizând metode de chimie computațională precum MP2 și DFT.	Explicația, studiu de caz, conversația	3 ore; [1, 6, 7]
Modelarea computațională a spectrelor de absorbție electronică și în IR	Explicația, studiu de caz, conversația	2 ore; [6, 7]
Investigarea structurii electronice utilizând diverse seturi de baze și metode ale chimiei cuantice	Explicația, studiu de caz, conversația	2 ore; [1, 6, 7]
Modelarea suprafețelor de potențial și determinarea structurilor moleculare cheie implicate în căile de reacție	Explicația, studiu de caz, conversația	2 ore; [1, 6, 7]

Bibliografie

- 1) W. F. Polik, J. R. Schmidt, WebMO: Web-based computational chemistry calculations in education and research, WIREs Computational Molecular Science, vol. 12, issue 1, **2021**.
- 2) 6) A. Lupan, A. M. V. Brânzaniuc, R. Silaghi-Dumitrescu, Elemente de chimie computațională, Presa Universitară Clujeană, Universitatea Babeș-Bolyai, **2024**.
- 3) A. Onu, M. O. Apostu, Chimia fizică a stărilor de agregare, MatrixROM, București, **2004**.
- 4) P. Atkins, J. dePaula, Physical Chemistry, 9th ed., W. H. Freeman, NY, **2010**.
- 5) C. A. Trapp, M. P. Cady, C. Giunta, Instructor's solution manual to accompany Atkins' Physical Chemistry, 9th ed., W. H. Freeman, NY, **2010**.
- 6) J. B. Foresman, Aileen Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods - 2nd ed., Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, **1996**
- 7) 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

- Conținutul disciplinei “Chimie computațională și termodinamică statistică” este corelat cu competențele profesionale (CP) și transversale (CT) prevăzute pentru programul de studii universitare de licență Chimie (CH) și cu cerințele actuale ale domeniului de cercetare-dezvoltare din care face parte și al analizelor fizico-chimice din industria chimică.
- Conținuturile disciplinei sunt orientate spre dezvoltarea capacității studenților de a utiliza corect concepte, metode și tehnici specifice domeniului de modelare computațională și termodinamică statistică, de a interpreta determinări experimentale pe baza modelării teoretice și computaționale, de a analiza critic rezultatele obținute și de a respecta cerințele privind calitatea, trasabilitatea, siguranța și buna practică de laborator.
- Conținuturile disciplinei sunt corelate cu necesitățile pieței muncii și cu cerințele angajatorilor din domeniile conexe programului de studii Chimie–laboratoare de cercetare, unități de control al calității, industrie chimică și farmaceutică, unde capacitatea de a interpreta și modela fenomene chimice prin instrumente computaționale reprezintă o competență din ce în ce mai solicitată. Prin conținutul teoretic și practic, disciplina contribuie la pregătirea absolvenților pentru o inserție profesională relevantă și pentru continuarea formării în domeniul chimiei, în acord cu cerințele actuale ale angajatorilor și cu direcțiile de dezvoltare ale domeniului.

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	
		Test	100	Da	
Laborator	Forma de evaluare		Verificare mixtă		
	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	

10.3 Mențiuni (situații speciale în evaluare)

- Evaluarea studenților se realizează în conformitate cu cerințele și criteriile de evaluare prezentate la începutul semestrului, cu respectarea principiilor obiectivității, transparenței și egalității de șanse.
- Criteriile de evaluare reflectă direct rezultatele învățării vizate la nivelul programului de studii Chimie (CH), respectiv al disciplinei Chimie Computațională și termodinamică statistică.
- În cazul activităților practice de laborator, recuperarea activităților neefectuate se realizează, în limita posibilităților organizatorice, prin activități practice stabilite de cadrul didactic titular, cu respectarea cerințelor privind securitatea și sănătatea în muncă și a condițiilor specifice laboratorului.
- Pentru studenții cu cerințe educaționale speciale sau cu situații medicale documentate, modalitatea și condițiile de evaluare pot fi adaptate, în conformitate cu prevederile regulamentelor instituționale fără diminuarea standardelor de competență și a rezultatelor învățării prevăzute pentru disciplină.

Intenția de fraudă și fraudă se pedepsesc conform regulamentelor în vigoare.

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.
- Nota 5 (cinci), conform baremului, reprezintă nota minimă necesară pentru promovarea fiecăreia dintre probele de evaluare prevăzute la punctele 10.1 – Evaluare continuă.
- Pentru fiecare probă de evaluare, acordarea notei se realizează în conformitate cu baremul specific, pe baza criteriilor și a rezultatelor învățării prevăzute în fișa disciplinei.
- Studenții care nu obțin minimum nota 5 (cinci) la Evaluarea continuă, au posibilitatea să îndeplinească această condiție în sesiunea de restanțe.

- Nota finală se stabilește pe baza ponderii aferentă componentei de evaluare prevăzută la punctul 10.1, cu respectarea condițiilor minime de promovare stabilite pentru fiecare tip de evaluare.

**Data completării,
23.09.2026**

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

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

Lect. Dr. MIHAI DUMITRAS

Lect. Dr. MIHAI DUMITRAS

Data avizării în departament,

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