

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Fizică
1.3 Departamentul	Departamentul de Fizică Biomoleculară
1.4 Domeniul de studii	Fizică Computațională
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu	Fizică Computațională

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Calculul Proprietăților Moleculare / Calculation of Molecular Properties						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. dr. Vasile Chiș						
2.3 Titularul activităților de seminar	-						
2.4 Titularul activităților de laborator	Prof.dr. Vasile Chiș						
2.5 Anul de studiu	II	2.6 Semestrul	IV	2.7 Tipul de evaluare	Ex	2.8 Regimul disciplinei	DS

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	Din care:				
3.2 curs	2	3.3 seminar	0	3.4 laborator	1	
3.5 Total ore din planul de învățământ	42	Din care:				
3.6 curs	28	3.7 seminar	0	3.8 laborator	14	
Distribuția fondului de timp:						ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe						28
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren						14
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri						28
Tutoriat						14
Examinări						4
Alte activități:						-
3.9 Total ore studiu individual	72					
3.10 Total ore pe semestru	132					
3.11 Numărul de credite	5					

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	Fizica moleculei, Calcul diferențial și integral
4.2 de competențe	Utilizarea calculatorului, prelucrarea și analiza informației

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Sală adecvată, tablă, videoproiector, computer
5.2 de desfășurare a seminarului	-
5.3 de desfășurare a laboratorului	Sală adecvată, tablă, videoproiector, rețea de calculatoare, acces internet

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> - Aplicarea cunoștințelor dobândite pentru definirea și formularea problemelor de cercetare în chimiei computaționale - Efectuarea de calcule (experimente in silico) pe sisteme moleculare simple și complexe evaluarea rezultatelor acestora pe baza modelelor teoretice existente. - Utilizarea infrastructurii de calcul pentru simulări și modelări moleculare și pentru extragerea informației din baze de date specifice - Corelarea rezultatelor experimentale și teoretice - Comunicarea ideilor științifice complexe, a concluziilor experimentelor sau a rezultatelor unui proiect științific. - Utilizarea echipamentelor și programelor de calcul de proprietăți moleculare în domenii restrânse sau interdisciplinare. - Capacitate avansată de planificare și organizare. - Dezvoltarea și folosirea de aplicații informatice pentru rezolvarea diferitelor probleme de fizică - Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul fizicii
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> - Analiza critică și evaluarea modelelor științifice - Participarea la un proiect de cercetare, planificarea și conducerea proiectelor de cercetare - Aplicarea valorilor și eticii profesiei de cercetător și executarea responsabilă a sarcinilor profesionale în condiții de autonomie și luare de decizii bazate pe evaluare și autoevaluare. - Aplicarea strategiilor de muncă eficientă în echipă multidisciplinară pe diverse paliere ierarhice. - Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională. - Autoevaluarea obiectivă a nevoii de formare profesională, continuă, în scopul inserției pe piața muncii și al adaptării la dinamica cerințelor acestora și pentru dezvoltarea personală și profesională și utilizarea eficientă a abilităților multilingvistice și a cunoștințelor de tehnologia informației și a comunicării. - Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată. - Identificarea rolurilor și responsabilităților într-o echipă și aplicarea de tehnici de relaționare și muncă eficientă în cadrul echipei. - Documentarea în limba română și cel puțin într-o limbă străină, pentru dezvoltarea profesională și personală, prin formare continuă și adaptarea eficientă la noile descoperiri științifice. Identificarea oportunităților de formare continuă și valorificarea eficientă a resurselor și tehnicilor de învățare pentru propria dezvoltare.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Însușirea fundamentelor teoretice și computaționale și formarea deprinderilor practice pentru modelarea sistemelor moleculare cu ajutorul computerelor
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Însușirea principiilor, metodelor și tehnicilor computaționale pentru calculul diferitelor proprietăți moleculare • Utilizarea eficientă a resurselor computaționale pentru modelări moleculare • Formarea abilităților de calcul și analiză a proprietăților moleculare și utilizarea acestora în caracterizarea proprietăților materialelor • Transfer de cunoștințe și înțelegerea fenomenelor complexe din fizica cuantică, fizica moleculei și informatică • Dezvoltarea direcțiilor de interdisciplinaritate: fizică, informatică, chimie, medicină

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Curs 1 Introduction Classification of computational methods; Empirical and semiempirical methods; Quantum chemical methods Type of calculations; Z-matrix	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 2 Molecular Hamiltonian, Born-Oppenheimer and Hartree approximation Atomic units; Molecular Hamiltonian Born-Oppenheimer approximation Hartree approximation	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 3 Hartree-Fock and Hartree-Fock-Roothaan equations Hartree-Fock approximation Hartree-Fock-Roothaan equations	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 4 Basis sets STO and GTO orbitals; Basis functions and basis sets; CBS extrapolation Mulliken population analysis	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 5 Method for electronic correlation Post Hartree-Fock methods for electronic correlation CI methods; MP2 method	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 6 Principles of DFT methods Hohenberg-Kohn theorems; Kohn-Sham formalism;	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 7 Exchange-correlation functionals Local density approximation; Generalized Gradient Approximation (GGA); Types of exchange-correlation functionals	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 8 Excited molecular states Time dependent density functional theory TD-DFT calculations of absorption and emission spectra	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator și mijloace vizuale	2 ore
Curs 9 Solvent effects and Solvation methods Continuum solvation methods Discrete solvation methods	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator și mijloace vizuale	2 ore
Curs 10 Thermochemistry; calculation of thermochemical data; ZPVE, enthalpy, Gibbs free energy	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 11 Molecular spectra calculations Vibrational spectra calculation; IR and Raman intensities; scaling procedures; assignment of experimental spectra	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 12 Molecular spectra calculations NMR and EPR spectra calculation; assignments of experimental spectra; CBS extrapolation for chemical shifts calculation	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore

Curs 13 DFT methods with dispersion correction Grimme's method for dispersion corrections Dispersion correcting potentials	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Curs 14 Intermolecular interactions Interaction energy calculation; Basis set superposition error Weak intermolecular interactions	prelegerea combinată, se vor utiliza: tablă, calculator, soft dedicat și mijloace vizuale	2 ore
Bibliografie		
<ol style="list-style-type: none"> 1. J.B. Foresman, A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd edition, 2015, http://expchem3.com/ (http://www.gaussian.com/g_pix/e3_cover.jpg) 2. A. Frisch, Gaussian 09W Reference, http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/g09w_ref_toc.htm 3. Aelen Frisch, Hrant P. Hratchian, Roy D. Dennington II, Todd A. Keith, John Millam, GaussView reference, http://www.gaussian.com/g_tech/gv5ref.htm (http://www.gaussian.com/g_dl/gv5ref_nav.pdf.zip) 4. A.Szabo, N.S.Ostlund, <i>Modern Quantum Chemistry; Introduction to Advanced Electronic Structure Theory</i>, McGraw-Hill Publishing Company, New York, 1989 5. Wolfram Koch, Max C. Holthausen, <i>A Chemist's Guide to Density Functional Theory</i>, Wiley, 2001 6. D. C. Young, <i>Computational Chemistry</i>, John Wiley and Sons, 2001 7. W. Kohn, A. D. Becke, and R. G. Parr, Density Functional Theory of Electronic Structure, <i>J. Phys. Chem.</i>100, 12974-12980 (1996) 8. M. L. Senent, S. Wolson, Intramolecular Basis Set Superposition Errors, <i>International Journal of Quantum Chemistry</i>, Vol. 82, 282-292 (2001) 9. Christopher J. Cramer and Donald G. Truhlar, Implicit Solvation Models: Equilibria, Structure, Spectra and Dynamics, <i>Chem. Rev.</i> 99, 2161-2200(1999) 10. Martin Schutz, Steve Brdarski, Per-Olof Widmark, Roland Lindh, and Gunnar Karlstrom, The water dimer interaction energy: Convergence to the basis set limit at the correlated level, <i>J. Chem. Phys.</i> 107 4597-4605 (1997) 11. A mathematical and computational review of Hartree-Fock SCF methods in quantum chemistry by P. Echenique and J.L. Alonso (http://arxiv.org/abs/0705.0337) 12. Quantum Chemistry-Computational Chemistry by D. Sherrill (http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/) 		
8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
8.3 Laborator	Metode de predare	Observații
1. Molecular geometry specification; Cartesian coordinates; Z-matrix formalism	Prelegere	1 oră
2. Fractional and Cartesian coordinates; Tinker program; pdb and cif- type files; Mercury and Molegro Molecular Viewer software	Discutie individuală	1 oră
3. Geometry optimizations; Fully and partially optimized geometries of water and H ₂ O ₂ molecules	Discutie individuală	1 oră
4. Calculation of rotational barrier in ethane and inversion barrier of ammonia	Discutie individuală	1 oră
5. Calculation of H bonding parameters in DNA base pairs	Discutie individuală	1 oră
6. Conformers and tautomers; Boltzmann populations of molecular conformers	Discutie individuală	1 oră
7. Ionization potential and electron affinity for a series of isoelectronic molecules; Proton affinity for pyridine	Discutie individuală	1 oră
8. Normal modes of vibration; Calculation of harmonic and anharmonic vibrational (IR and Raman) spectra of benzene	Discutie individuală	1 oră
9. Absorption spectra molecules: correlation between the experimental and computational data for formaldehyde	Discutie individuală	1 oră
10. Calculation of NMR spectra of ethanol	Discutie individuală	1 oră
11. Calculation of ESR spectra for paramagnetic systems; CBS extrapolation for calculating hyperfine coupling constants of CH ₃ radical	Discutie individuală	1 oră
12. Solvent effects: Solvent modeling; continuum and discrete models of solvation; Calculation of NMR spectrum of solvated levetiracetam	Discutie individuală	1 oră
13. Calculation of binding energies for the water dimer and DNA base pairs	Discutie individuală	1 oră
14 Molecular excited states: geometry optimizations and adiabatic excitation	Discutie individuală	1 oră

Bibliografie

1. J.B. Foresman, A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd edition, 2015, <http://expchem3.com/> (http://www.gaussian.com/g_pix/e3_cover.jpg)
2. A. Frisch, Gaussian 09W Reference, http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/g09w_ref_toc.htm
3. Aileen Frisch, Hrant P. Hratchian, Roy D. Dennington II, Todd A. Keith, John Millam, GaussView reference, http://www.gaussian.com/g_tech/gv5ref.htm (http://www.gaussian.com/g_dl/gv5ref_nav.pdf.zip)
4. J.A. Pople, D.L. Beveridge, *Approximate Molecular Orbitals Theory*, McGraw-Hill, New York, 1970
5. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley and Sons, New York, 2001
6. T. Heine, J.O. Joswig, A. Gelessus, *Computational Chemistry Workbook*, Wiley-VCH, 2009
7. C.J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry*, John-Wiley and Sons, 2002
8. C.F. Macrae, P.R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, G.P. Shields, R. Taylor, M. Rowler, J. van de Streek, Mercury: visualization and analysis of crystal structures, *J. Appl. Crystallogr.* 39:453-457, 2006
9. Molegro Molecular Viewer, version 2.5. Molegro ApS; Aarhus, Denmark: 2012
10. www.gaussian.com

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

Conținutul disciplinei este în concordanță cu ceea ce se studiază în alte centre universitare din țară (Timișoara, Iași, București) și străinătate. Pentru adaptarea la cerințele impuse de piața de muncă, conținutul disciplinei a fost armonizat cu cerințele impuse de specificul învățământului preuniversitar, al institutelor de cercetare și al mediului de afaceri.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Cunoștințe dobândite	Examen scris	50
10.5 Seminar	Activitate	Tematici rezolvate	0
10.6 Laborator	Activitate	Experimente realizate	50
10.7 Standard minim de performanță			
Optimizarea geometriei, calculul și atribuirea spectrului de vibrație, de absorbție sau RMN al unei molecule de dimensiune medie			

Semnătură titular curs
Prof.dr. Vasile Chiș

Semnătură titular seminar

Semnătură titular laborator
Prof.dr. Vasile Chiș

Data completării

27.05.2016

Data avizării în departament

Semnătură director de departament