

**UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA
FACULTATEA CHIMIE ȘI TEHNOLOGIE CHIMICĂ
DEPARTAMENTUL CHIMIE**

CURRICULUM

la disciplina

“Chimie computațională”

Ciclul I, Licență, anul II

Program Chimie

Titular de curs:
Iolanta Bălan

APROBAT

la ședința Departamentului

din „13” septembrie 2019

Șef Departament **Íon Bulimestru,**
dr., conf. univ.

CHIȘINĂU 2020

PRELIMINARII

Cursul teoretico-practic la disciplina ”Chimie computațională” are drept scop de a familiariza studenții cu principiile de lucru a programelor cuanto-chimice de calcul, obținerea și interpretarea rezultatelor obținute prin calcul. În cadrul acestui curs sunt examinate metodele contemporane de calcul (*ab initio*, DFT, semiempirice), calculul parametrilor geometrici de echilibru ale sistemelor moleculare, calculul profilurilor energetice a reacțiilor chimice, precum și aspectele teoretice din mecanica și chimia cuantica. Pe lângă aceasta, în curs sunt prezentate unele aspecte ale Teoriei Grupurilor (tipurile de grupuri punctuale de simetrie, reprezentările ireductibile), metoda Hartree-Fock, metoda legăturii de valență, teoria orbitalilor moleculari.

În urma efectuării lucrărilor practice la calculator studenții vor fi capabili să efectueze calcule cuanto-chimice ale moleculelor simple, să determine parametrii geometrici ai moleculei și să-i compare cu valorile experimentale, să determine toate configurațiile geometrice posibile pentru sistemul molecular dat, să determine repartizarea și reprezentarea orbitalilor moleculari, să determine orbitalii HOMO și LUMO și intervalul HOMO-LUMO, să determine și să compare energetic stările diferite de spin a unui sistem molecular.

Cunoștințele și aptitudinile obținute în cadrul cursului „Chimie computațională” vor ajuta studenții la studiul diferitor aspecte structurale și explicarea anumitor fenomene în baza structurii electronice.

Limba de predare a disciplinei – română.

Beneficiarii cursului – studenții Facultății Chimie și Tehnologie Chimică, specialitatea „Chimie”.

I. ADMINISTRAREA DISCIPLINEI

Forma de învățământ	Codul disciplinei	Denumirea disciplinei	Responsabil de disciplină	Semestrul	Ore total:				Evaluare	Nr. de credite	
					Total	inclusiv					
						C	S	L			LI
cu frecvență la zi	F04O027	Chimie computațională	Iolanta Bălan	IV	120	26	26	-	68	examen	4,0
cu frecvență redusă											

II. TEMATICA ȘI REPARTIZAREA ORIENTATIVĂ A ORELOR

Nr. d/o	Unitate de învățare	Ore		
		Curs	Seminar	Lucrul individual
1.	Introducere în chimia computațională. Istoricul apariției și dezvoltării chimiei computaționale. Noțiuni introductive, caracteristici, posibilități, domenii de aplicare și importanța.	2	2	2
2.	Metode de calcul: empirice, semiempirice, <i>ab initio</i> și DFT.	2	2	3
3.	Programe de calcule cuanto-chimice și de vizualizare. Programele GAMESS și ChemCraft. Principiile de lucru. Introducerea datelor. Lucrul cu fișierele (copierea, editarea, salvarea).	2	2	3
4.	Tipuri de calcule. Seturi de bază. Conceptul Suprafeței Energiei potențiale – SEPA. Modelare computațională: <ul style="list-style-type: none"> • Calcule Single-Point • Optimizarea geometriei. • Calculul frecvențelor vibrațiilor. 	2	2	3
5.	Crearea fișierelor <i>inp</i> pentru molecule simple. Spinul total (multiplicitatea) al sistemului molecular. Parametrii geometrici.	2	2	3
6.	Citirea fișierelor <i>out</i> . Determinarea orbitalilor moleculari HOMO și LUMO. Calculul profilului energetic al reacției. Bariera de reacție.	2	2	3
7.	Elemente fundamentale ale mecanicii și chimiei cuantice: Natura cuantică a materiei. Dualismul undă - corpuscul. Ecuația lui Schrödinger. Sensul fizic al funcției de undă.	2	2	3
8.	Hamiltonianul unui sistem atomic cu mai mulți electroni. Metoda Hartree – Fock (RHF, ROHF, UHF). Aproximația Born – Oppenheimer.	2	2	3
9.	Abordarea sistemelor moleculare în chimia cuantică-1: <ul style="list-style-type: none"> • Metoda legăturii de valență (MLV). Molecula de hidrogen în teoria legăturii de valență. Natura legăturii chimice.	2	2	3
10.	Abordarea sistemelor moleculare în chimia cuantică-2: <ul style="list-style-type: none"> • Metoda orbitalelor moleculare (MOM). • Metoda MO LCAO (studiul general). 	2	2	3
11.	Metode π -electronice de calcul al chimiei cuantice - Metoda Huckel.	2	2	3
12.	Teoria grupurilor. Operații de simetrie. Grupurile de simetrie punctuală. Reprezentările ireductibile ale funcțiilor de undă a OM.	2	2	3
13.	Efectul și Pseudo-efectul Jahn-Teller ca unica sursă de instabilitate a structurii înalt simetrice a configurației nucleare.	2	2	3
	Total	26	26	68

V. LUCRUL INDIVIDUAL AL STUDENTULUI

Nr.	Produsul preconizat	Strategii de realizare	Criterii de evaluare	Termen de realizare
1.	Calculule cuantochimice pentru diverse sisteme moleculare folosind metodele și criteriile de calcul respective.	<ul style="list-style-type: none"> - alcătuirea algoritmului de lucru; - pregătirea fișierului de lucru cu datele inițiale a sistemului molecular dat (cu extensiunea <i>inp</i>); - efectuarea calculului; - citirea fișierelor de ieșire (cu extensiune <i>out</i>); - extragerea și prezentarea datelor obținute din calcule; - prezentarea noțiunilor teoretice corespunzătoare. 	<ul style="list-style-type: none"> - formularea clară și concretă a problemei de calcul; - indicarea programului de calcul; - descrierea succintă a metodei utilizate; - indicarea tipului și metodei de calcul utilizate și a caracteristicilor sistemului dat (parametrilor geometrici, stării de spin, simetria, etc.); - indicarea corectă a comenzilor de calcul; - denumirea fișierului de calcul; - operarea cu fișierele de calcul; - deschiderea, citirea și vizualizarea fișierelor obținute; - determinarea corectitudinii calculului respectiv (criteriile de convergență); - indicarea valorilor și unităților de măsură respective pentru marimile extrase: energia totală, parametrii geometrici (lundimea legăturii și unghiul de valență), etc.; - exactitatea valorilor mărimilor calculate; - compararea valorilor mărimilor respective obținute teoretic cu cele experimentale; - expunerea succintă și logică a noțiunilor teoretice; - descrierea abrevierilor și indicarea semnificației lor. 	<p>Fiecare raport se prezintă în decurs de 2 săptămâni din ziua efectuării lucrării de laborator. În cazul depășirii termenului de 2 săptămâni, nota se va scădea cu 0,5 puncte pentru fiecare săptămână întârziere.</p>
2.	Referat la tema propusă (temele sunt prezentate în anexă)	<ul style="list-style-type: none"> - analiza surselor bibliografice; - schițarea planului referatului; - sinteza informației și generalizarea ei; - prezentarea materialului sub o formă logică și consecutivă; - prezentarea analizei proprii asupra temei; - concluzionare. 	<ul style="list-style-type: none"> - formularea titlului lucrării; - structura (introducere, cuprins, concluzii, bibliografie); - stilul (redactare, logica derulării, expresivitatea ilustrațiilor grafice); - reflectarea conceptelor, teoriilor, noțiunilor; folosirea corectă a acestora; - utilizarea bibliografiei (este legată strict de subiect, grad de prelucrare, actualitatea surselor folosite etc.); 	<p>Cu cel puțin o săptămână înainte de sfârșitul semestrului sub forma imprimată și electronică.</p>

			- complexitatea cercetării; - profunzimea analizei și pertinența concluziilor; - creativitatea.	
--	--	--	--	--

BIBLIOGRAFIE RECOMANDATĂ:

1. Rogers D. W. *Computational Chemistry Using the PC*. A John Wiley & Sons Inc., New Jersey, 2003;
2. Lewars E. *COMPUTATIONAL CHEMISTRY. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. Kluwer Academic Publishers. New York. 2004;
3. Cramer Ch. J. *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*. John Wiley & Sons Ltd, Chichester, England, 2004;
4. Jensen F. *Introduction to Computational Chemistry*. John Wiley & Sons Ltd, 2007;
5. Lowe J.P. *Quantum Chemistry. Student edition*. NY, Academia Press, 1978;
6. P.W. Atkins, R.S. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*. Oxford University Press, USA; 5 edition, 2010
7. La Paglia S.R. *Introductory quantum chemistry*. NY, Harner Raw, 1971.
8. Atkins P. W., Trapp C. A. *Tratat de chimie fizică*. București: Ed. Tehnică, 1996.
9. Titeica Șerban , *Mecanica cuantică*. București. 1984.
10. Negoiu D., Negoiu M., *Structura combinațiilor anorganice*. Ed. Tehnice, București, 1987
11. Murgulescu I.C. *Introducere în chimie fizică*. v.1, 1, Atomi. Molecule. Legătura chimică. Ed. Academiei Republ. România, București, 1976.
12. I.G. Murgulescu, *Introducere în Chimia fizică - Structura și proprietățile moleculelor*. vol. I, 2, Editura Academiei Române, București, 1978
13. Julg A. *Chimie cuantică*. București, 1971.
14. Давыдов А.С. *Квантовая механика*. Москва, 1973.
15. Мелешина А.М. *Курс квантовой механики для химиков*. Москва, 1980.