



FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea din Craiova
1.2. Facultatea	Științe
1.3. Departamentul	Chimie
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclul de studii universitare	Licență
1.6. Forma de organizare	IF
1.7. Programul de studii	Biochimie tehnologică

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Modelare moleculară						
2.2. Titularul activităților de curs	Lect.univ.dr. Aurelian DOBRIȚESCU						
2.3. Titularul activităților de seminar	Lect.univ.dr. Aurelian DOBRIȚESCU						
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	4	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7. Regimul disciplinei	DOB

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

3.1. Numărul de ore pe săptămână	4	din care: 3.2 curs	2	3.3. seminar	2
3.4. Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.5 curs	2	3.6. seminar	2
Distribuția fondului de timp – ore / săptăm.					
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					9
Tutoriat					4
Examinări (test curs + examen final)					6
Alte activități (pregătire proiect final, prelucrare rezultate)					8
3.7. Total ore studiu individual					69
3.8. Total ore pe semestru					125
3.9. Numărul de credite					5

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	<ul style="list-style-type: none">cunoștințe de chimie generală, chimie organică și chimie fizică;noțiuni de bază de mecanică cuantică și spectroscopie (nivel introductiv);competențe digitale elementare și familiarizare cu software de vizualizare moleculară;noțiuni de biochimie structurală (structura proteinelor – recomandat);capacitatea de a analiza date științifice și de a redacta rapoarte tehnice.
4.2. de competențe	<ul style="list-style-type: none">competențe cognitive (cunoștințe de bază);competențe instrumentale (abilități practice);competențe digitale;competențe de analiză și interpretare;competențe de comunicare științifică.

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none">• Tablă interactivă, Sistem de videoproiecție, Sistem audio adecvat, Rețea stabilă de internet, Sistem de management al resurselor și învățării (Google Classroom), Laptop.• Resurse digitale (suport de curs în format electronic, bibliografie electronică actualizată, bibliotecă de imagini și figuri explicative).
5.2. de desfășurare a seminarului	<ul style="list-style-type: none">• Tablă interactivă, Sistem de videoproiecție, Sistem audio adecvat, Rețea stabilă de internet, Acces la resurse electronice, Instrumente digitale, Google Classroom, Laptop.• Resurse digitale (seturi de date și fișiere de lucru, tutoriale video, ghiduri de utilizare pentru software).

6. Obiectivele disciplinei - rezultate așteptate ale învățării la formarea cărora contribuie parcurgerea și promovarea disciplinei

Cunoștințe	Studentul/Absolventul: <ol style="list-style-type: none">1. Studentul/absolventul formulează soluții pentru probleme chimice complexe, inclusiv cu respectarea normelor de mediu.2. Studentul/absolventul descrie și integrează cunoștințe specifice și interdisciplinare în activitatea profesională.
Abilități (Aptitudini)	Studentul/Absolventul: <ol style="list-style-type: none">1. Studentul/absolventul interpretează responsabil rezultatele documentării în vederea comunicării acestora și rezolvă probleme complexe de chimie utilizând metode specifice domeniilor conexe.2. Studentul/absolventul aplică principiile științei pentru redactarea și prezentarea unor rapoarte științifice și aplică metode interdisciplinare adecvate pentru a rezolva probleme chimice complexe, teoretice și practice.
Responsabilitate și autonomie	Studentul/Absolventul: <ol style="list-style-type: none">1. Studentul/absolventul selectează cele mai adecvate rezultate ale informării/documentării și le transmite clar și concis celor interesați.2. Studentul/absolventul întocmește și prezintă rapoarte științifice respectând normele eticii în colectarea și redactarea rezultatelor asumându-și responsabilitatea de a gestiona colaborări interdisciplinare.

7. Conținuturi

7.1. CURS	Modalitatea de desfășurare	Metode de predare	Fond de timp alocat (ore)
1. Introducere în modelarea moleculară	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2
2. Reprezentarea moleculelor și coordonate structurale	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2
3. Câmpuri de forță (Force fields)	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2
4. Optimizarea geometriei moleculelor	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2
5. Calculul proprietăților energetice și vibraționale	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2
6. Introducere în metode cuantice: DFT și ab initio	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2

7. Proprietăți electronice	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2
8. Dinamica moleculară (MD)	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2
9. Simularea interacțiilor ligand-proteină (Docking molecular)	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2
10. QM/MM și simulări hibride	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	4
11. Modelare pentru materiale și nanostructuri	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	4
12. Validarea modelelor și analiza rezultatelor	Față în față	Expunere interactivă; studiu de caz aplicat	2

Bibliografie:

1. Peluso, P. et al., *Advances in molecular modeling tools for biomedical research*, **J. Mol. Graphics & Modelling**, **2024**.
2. Belghit, H. et al., *Visualizing molecular dynamics simulations*, **Frontiers in Bioinformatics**, **2024**.
3. Gromiha, M.M. & Selvaraj, S., *Modern force fields in computational biology*, **IJMS**, **2023**.
4. Shao, Y. et al., *Advances in geometry optimization algorithms*, **J. Chem. Theory Comput.**, **2022**.
5. Cerezo, J. et al., *Advances in quantum vibrational calculations*, **Chem. Reviews**, **2022**.
6. Mardirossian, N. & Head-Gordon, M., *Thirty years of DFT*, **Molecular Physics**, **2020**.
7. Lu, T. & Chen, F., *Molecular orbital analysis in modern QC*, **Comp. & Theoretical Chem.**, **2020**.
8. Rayhani, M., *Advancements in coarse-grained MD*, **Molecular Simulation**, **2020**.
9. Khrenova, M.G., *Modeling biomolecular binding: challenges and frontiers*, **IJMS**, **2022**.
10. Zhuang, Y-B. et al., *AI-accelerated QM/MD interface simulations*, **Scientific Data – Nature**, **2025**.
11. Zhou, K. et al., *Molecular modeling of materials and lubricants*, **Processes**, **2024**.
12. Belghit, H. et al., *Data clarity in molecular simulations*, **Frontiers in Bioinformatics**, **2024**.

7.2. Seminar/laborator	Modalitatea de desfășurare	Metode de predare	Fond de timp alocat (ore)
1. Construirea și vizualizarea structurilor moleculare	Față în față	Demonstrație practică în timp real, învățare prin descoperire ghidată, exerciții individuale cu feedback imediat.	2
2. Sisteme de coordonate și fișiere structurale	Față în față	Demonstrație aplicată pe exemple reale PDB/MOL2, învățare colaborativă (lucru în perechi), problematizare (identificarea erorilor în fișiere).	2
3. Câmpuri de forță și optimizare preliminară	Față în față	Explicație interactivă a conceptelor, demonstrație în Avogadro, aplicații practice individuale cu verificarea rezultatelor.	2
4. Generarea inputului Gaussian16	Față în față	Demonstrație procedurală în GaussView, instruire ghidată pas cu pas, aplicare individuală sub supervizare.	2

5. Optimizarea geometriilor în Gaussian	Față în față	Demonstrație în timp real a unui job de optimizare, rezolvare de probleme (analiza convergenței), învățare prin practică asistată.	2
6. Analiza vibrațională (IR)	Față în față	Demonstrație interpretare moduri vibraționale, învățare bazată pe comparații (simulat vs. teoretic), exerciții practice de identificare a frecvențelor.	2
7. Proprietăți electronice: HOMO–LUMO	Față în față	Demonstrație vizuală (orbitali în GaussView), explicație interactivă / dialogată, aplicații practice individuale.	2
8. Cartografierea densității electronice + electrostatice	Față în față	Demonstrație în ChimeraX / GaussView, identificarea zonelor electrofile / nucleofile, exercițiu aplicat de interpretare a hărților MEP.	2
9. Pregătirea pentru docking molecular	Față în față	Demonstrație de curățare PDB și pregătire ligand, învățare prin modelare procedurală, activitate practică asistată.	2
10. Docking molecular cu AutoDock Vina	Față în față	Demonstrație completă workflow receptor–ligand, învățare prin simulare și rezolvare de sarcini aplicate, verificarea și interpretarea individuală a scorurilor de binding.	2
11. Vizualizarea complexului ligand–proteină	Față în față	Demonstrație 3D în ChimeraX, învățare prin analiză interactivă, discuție ghidată privind interacțiile moleculare.	2
12. Metode QM/MM (introducere)	Față în față	Demonstrație conceptuală (framework ONIOM), problematizare (identificarea zonei QM vs. MM), exercițiu simplu de selectare fragment QM.	2
13. Mini-proiect individual (parțial)	Față în față	Mentorat individual, învățare prin proiect, analiză și corectare în timp real a etapelor de lucru.	2
14. Prezentarea rezultatelor și interpretare finală	Față în față	Prezentări orale ale studenților, feedback formativ și evaluare colegială, dezbateri critice asupra rezultatelor și metodologiilor.	2

Bibliografie:

1. Snyder, H. D.; Kucukkal, T. G., *Computational Chemistry Activities with Avogadro and ORCA*. Journal of Chemical Education, **2021**.
2. Pettersen, E. F. et al., *UCSF ChimeraX: Structure Visualization for Researchers, Educators, and Developers*. Protein Science, **2021**.
3. He, X. et al., *Recent Progress in General Force Fields of Small Molecules*. **2021**.
4. Gaussian, Inc., *New Chemistry with Gaussian 16 and GaussView 6*. Technical note, **2022**.
5. Gaussian, Inc., *New Chemistry with Gaussian 16 and GaussView 6* – secțiunile dedicate optimizării de geometrie și noilor capacități de calcul, **2022**.
6. Ditler, E. et al., *Vibrational Spectroscopy by Means of First-Principles Molecular Dynamics Simulations*. WIREs Computational Molecular Science, **2022**.
7. Rezvan, V. H. et al., *Molecular Structure, HOMO–LUMO, and NLO Studies of Substituted Systems Using DFT*, **2024**.
8. Lakshminarayanan, S. et al., *Molecular Electrostatic Potential (MEP) Surface Analysis of Chemo-sensors: An Extra Supporting Hand for Strength, Selectivity and Non-traditional Interactions*. **2021**.
9. Pettersen, E. F. et al., *UCSF ChimeraX: Structure Visualization for Researchers, Educators, and Developers*. Protein Science, **2021**.
10. AutoDock Vina 1.2.0: *New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings*. Journal of Chemical Information and Modeling, **2021**.
11. Pettersen, E. F. et al., *UCSF ChimeraX: Structure Visualization for Researchers, Educators, and Developers*. Protein Science, **2021**.
12. Tzeliou, C. E. et al., *Review on the QM/MM Methodologies and Their Applications*. Molecules, **2022**.
13. Haritha, M. et al., *Unveiling Drug Discovery Insights Through Molecular Modeling*. WIREs Computational Molecular Science, **2024**.
14. Torras Costa, J. et al., *Introduction to Molecular Modeling of Materials in an Undergraduate Engineering Degree*, **2022**.

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

Conținuturile disciplinei Modelare Moleculară sunt aliniate cu direcțiile actuale ale comunității epistemice din domeniul chimiei computaționale, biochimiei structurale, farmaceuticii și științei materialelor, reflectate în publicații recente ale forumurilor științifice internaționale (ACS, RSC, EuChemS). Evoluțiile recente subliniază necesitatea integrării în formarea universitară a competențelor digitale avansate, precum optimizarea structurilor moleculare, simularea proceselor dinamice, analiza vibrațională, studiul proprietăților electronice și utilizarea metodelor DFT, aspecte incluse integral în structura acestei discipline.

Curriculumul propus respectă recomandările organismelor profesionale relevante — American Chemical Society (ACS), Royal Society of Chemistry (RSC), European Chemical Society (EuChemS) — care evidențiază rolul esențial al modelării moleculare în proiectarea medicamentelor, investigarea interacțiunilor biomoleculare, dezvoltarea materialelor avansate și optimizarea proceselor chimice și farmaceutice. De asemenea, cursul promovează competențe de analiză, vizualizare și interpretare a datelor, aspecte identificate de comunitatea științifică drept fundamentale în formarea specialiștilor contemporani.

Prin structură și conținut, disciplina contribuie la formarea unei expertize relevante pentru cercetarea modernă, fiind coerent racordată la orientările comunității științifice internaționale și la cerințele reale ale pieței muncii în domeniul chimiei, biochimiei, farmaceuticii și științelor vieții.

9. Evaluare

Tip activitate	9.1. Criterii de evaluare	9.2. Metode de evaluare	9.3. Pondere din nota finală
9.4. Curs	Înțelegerea conceptelor teoretice fundamentale privind modelarea moleculară, optimizarea geometriilor, câmpuri de forță, analiză vibrațională, metodele DFT și dinamica moleculară, docking.	<ul style="list-style-type: none"> • Test scris cu itemi: grilă, întrebări deschise, probleme conceptuale. • Evaluare de tip „mini-eseu” pe teme teoretice. • Verificarea înțelegerii principiilor prin aplicații explicate oral. 	30%
	Capacitatea de explicare logică a metodelor de modelare moleculară.		
	Corectitudinea analizelor și interpretărilor teoretice.		
	Gradul de integrare a cunoștințelor de chimie moleculară cu cele computaționale.		
9.5. Seminar	Aplicarea corectă a metodelor computaționale în software specializat (Avogadro, GaussView, Gaussian16, ChimeraX, AutoDock Vina)	<ul style="list-style-type: none"> • Evaluare continuă pe baza fișelor de lucru. • Mini-teste aplicate la începutul anumitor seminarii. • Verificarea rezultatelor calculelor computaționale (optimizări, analiză vibrațională, docking). • Portofoliu de seminar (toate lucrările completate). • Prezentarea proiectului final (interpretare + rezultate + discuții). 	30% activitatea de seminar 40% proiectul final (raport scris 25% + prezentare 15%)
	Calitatea interpretării rezultatelor obținute prin calcule computaționale (geometrie optimizată, frecvențe vibraționale, HOMO–LUMO, energie de legare).		
	Acuratețea datelor din fișele de lucru și coerența explicațiilor.		
	Respectarea procedurilor de lucru și nivelul de autonomie și rigurozitate în realizarea sarcinilor practice.		
	Încadrarea în pașii metodologici predați.		

9.6. Standard minim de performanță

Studentul trebuie să demonstreze:

- Capacitatea de a efectua o optimizare geometrică completă și de a interpreta corect convergența.
- Identificarea și interpretarea frecvențelor vibraționale, detectarea eventualelor frecvențe imaginare.
- Generarea și interpretarea HOMO–LUMO, plus corelarea gap-ului energetic cu reactivitatea.
- Realizarea unui docking molecular funcțional: pregătire ligand și receptor, rulare Vina, analiză a energiei de legare.
- Predarea unui raport final care să includă: optimizare, analiză vibrațională, DFT, docking, concluzii.
- Minim 70% prezență la activitățile de seminar.
- Minim 5/10 la fiecare componentă obligatorie (test curs, seminar, proiect).

Data completării

01.09.2025

Titular de disciplină,

Lect.univ.dr. Aurelian Dobrițescu

Semnătura titularului

.....

Data avizării în departament

25.09.2025

Director de departament,

Conf.dr. Nicoleta Cioateră

Semnătura directorului de departament,

.....