

Anexă la Fișa Laboratorului: Aplicații software

pentru programul de studii : **Chimia și Ingineria Substanțelor Organice, Petrochimie și Carbochimie**

1. Informatică aplicată

Nr. crt.	Denumirea lucrării de laborator ^{x)}
1.	Calculatorul: elemente hardware și software. Sisteme de operare (Windows)
2.	Resurse electronice de documentare științifică.
3.	ChemSketch – editor de formule chimice
4.	Microsoft Office: Word
5.	Microsoft Office: Excel
6.	Microsoft Office: Power Point
7.	Matlab: scalari, vectori, matrice; operații uzuale; rezolvarea sistemelor de ecuații liniare
8.	Matlab: grafica 2D și 3D
9.	Instrucțiuni de control logic (if, if - else, for, while). Funcții ale utilizatorului

2. Optimizarea proceselor tehnologice

Nr. crt.	Denumirea lucrării de laborator ^{x)}
1.	Norme de protecția muncii în laborator. Matlab. Variabile, matrici, vectori. Grafice 2D și 3D. Funcția utilizatorului. Instrucțiuni de control logic
2.	Modele matematice ale unor echipamente din industria chimică și biochimică. Rezolvarea unor ecuații diferențiale prin metode numerice. Studii de caz: Algoritm Euler. Solve ode.
3.	Modelul matematic al unui reactor continuu cu amestecare perfectă. Rezolvarea sistemelor de ecuații neliniare prin metode numerice
4.	Modele matematice liniare și neliniare. Rezolvarea ecuațiilor de regresie liniare și neliniare în Matlab
5.	Metode de optimizare. Găsirea minimului unei funcții de o variabilă și respectiv de mai multe variabile. Utilizarea toolbox-ului de optimizări al Matlab

3. Modelarea și proiectarea reactoarelor chimice

Nr. crt.	Denumirea lucrării de laborator ^{x)}
1.	Norme de protecția muncii în laborator. Tipuri de reactoare utilizate în industria chimică. Reactoare continue și discontinue. Reacții stoechiometric independente
2.	Modelul matematic al unui reactor real. Modelul matematic al unei cascade de trei reactoare cu amestecare perfectă. Determinarea experimentală a duratei de staționare cu un semnal trasor. Aplicații în Matlab
3.	Efectele termice ale reacțiilor chimice catalitice. Aplicații numerice
4.	Determinarea experimentală a duratei de staționare cu un semnal trasor pentru un reactor continuu cu amestecare perfectă. Modelarea matematică în Matlab
5.	Proiect: Modelarea matematică a reactoarelor tip șarjă, cu amestecare perfectă și tip piston cu dispersie axială în Matlab. Studii de caz

4. Proiectare asistată

Nr. crt.	Denumirea lucrării de laborator ^{x)}
1.	Introducere în Aspen Hysys: interfața, flowsheet, property packages, PFD. Scheme de flux și integrarea lor în Aspen Hysys
2.	Operații unitare în Aspen Hysys: amestecătoare, pompe, separatoare, compresoare, etc.
3.	Proiectarea schimbătoarelor de căldură utilizând Aspen Hysys
4.	Distilarea în Aspen Hysys
5.	Reactoare în Aspen Hysys
6.	Absorbere în Aspen Hysys
7.	Simularea proceselor cu recirculare în Aspen Hysys
8.	Studiu de caz: proiectarea instalației necesare pentru obținerea unui compus organic. Studenții lucrează în echipe de câte 2 și prezintă schema de proiectare

^{x)} Conform pct. 8.2 din Fișa disciplinei “Proiectare asistată”

5. Opțional X – Reactivitate chimică și activitate biologică

Nr. crt.	Denumirea lucrării de laborator ^{x)}
1.	Introducere în relația structură–reactivitate–activitate biologică. Tipuri de interacțiuni moleculare relevante în sisteme biologice: legături de hidrogen, interacțiuni electrostatice, hidrofobe și van der Waals
2.	Structura tridimensională a proteinelor. Niveluri de organizare structurală; situsuri active și situsuri de legare; reziduuri catalitice; flexibilitate conformațională și complementaritate moleculară.
3.	Baze de date structurale și identificarea Țintelor biologice. Structuri experimentale și modele predictive; selecția structurii proteice și evaluarea calității modelului
4.	Vizualizarea proteinelor și a complexelor proteină–ligand. Reprezentări moleculare, identificarea cavităților, măsurarea distanțelor și unghiurilor, analiza reziduurilor din situsul de legare
5.	Pregătirea structurilor pentru studii computaționale. Pregătirea proteinei și ligandului, protonare, sarcini, conformeri, minimizare energetică și definirea spațiului de căutare
6.	Principiile dockingului molecular. Algoritmi de căutare, funcții de scor, rigiditatea/flexibilitatea receptorului și ligandului, validarea protocolului prin redocking și RMSD
7.	Analiza rezultatelor de docking. Poze de legare, energie/score de legare, clustering, interacțiuni cu reziduurile aminoacidice; criterii geometrice și interpretarea plauzibilității biologice
8.	Relații structură–activitate (SAR/QSAR) și descriptori moleculari. Corelarea proprietăților fizico-chimice și structurale cu activitatea biologică; limitele modelelor predictive
9.	Studii de caz integrate: de la structura ligandului la interacțiunea cu ținta biologică. Interpretarea critică a rezultatelor, limitele dockingului și complementaritatea cu date experimentale

^{x)} Conform pct. 8.2 din Fișa disciplinei “Opțional X – Reactivitate chimică și activitate biologică.”

6. Opțional X – Mecanisme de reacție

Nr. crt.	Denumirea lucrării de laborator ^{x)}
1.	Analiza materiilor prime, intermediarilor și a produsilor de reacție
2.	Analiza conformațională; studiul barierelor de rotație
3.	Metode cinetice de analiză: aplicații spectroscopice; ecuația Hammett

^{x)} Conform pct. 8.2 din Fișa disciplinei “Opțional X – Mecanisme de reacție.”