



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

FIȘA DISCIPLINEI

INTRODUCERE ÎN CHIMIE CUANTICĂ

Anul universitar 2025/2026.

1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai din Cluj Napoca
1.2. Facultatea	Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică
1.3. Departamentul	Departamentul de Inginerie Chimică
1.4. Domeniul de studii	Științe inginerești aplicate
1.5. Ciclul de studii	Licență
1.6. Programul de studii / Calificarea	Nanoștiințe / inginer
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Introducere în chimie cuantică			Codul disciplinei	CLR1058
2.2. Titularul activităților de curs	Conf. Dr. Abil. Alexandru Lupan				
2.3. Titularul activităților de seminar	Conf. Dr. Abil. Alexandru Lupan				
2.4. Anul de studiu	III	2.5. Semestrul	5	2.6. Tipul de evaluare	E
				2.7. 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/ ~~laborator~~ /	1
3.4. Total ore din planul de învățământ	42	din care: 3.5. curs	28	3.6 seminar	14
Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					14
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat (consiliere profesională)					6
Examinări					4
Alte activități					-
3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)				58	
3.8. Total ore pe semestru				100	
3.9. Numărul de credite				4	

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	Nu este cazul
4.2. de competențe	Nu este cazul



UNIVERSITATEA BABES-BOLYAI
BABES-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABES-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABES-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele închise Nu va fi acceptată întârzierea
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	Studentii se vor prezenta la seminar cu telefoanele închise Studentii se vor prezenta la seminar cu calculatoare științifice Nu va fi acceptată întârzierea

6.1. Competențele specifice acumulate¹

Competențe profesionale/esențiale	- Recunoașterea și descrierea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor și modelelor din chimia cuantică; - Aplicarea și interpretarea proprietăților structurale ale materialelor; - Aplicarea noțiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii compușilor chimici; - Identificarea și folosirea conceptelor, metodologiilor și a teoriilor pentru rezolvarea unor probleme complexe din domeniul chimiei și a științei materialelor; - Folosirea cunoștințelor de chimie cuantică pentru determinarea, explicarea și interpretarea aplicațiilor în nanoștiință.
Competențe transversale	- Executarea sarcinilor profesionale conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit și cu îndrumare calificată; - Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate; - Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română și într-o limbă de circulație internațională cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare.

6.2. Rezultatele învățării

Cunoștințe	Studentul cunoaște noțiunile de bază de mecanică cuantică. Studentul cunoaște metodele de modelare ale Hamiltonianului.
Aptitudini	Studentul este capabil să înțeleagă și să aplice principiile mecanicii cuantice pentru a rezolva probleme de chimie cuantică. Studentul este capabil să exploreze suprafețele de energie potențială pentru molecule mici.

¹ Se poate opta pentru competențe sau pentru rezultatele învățării, respectiv pentru ambele. În cazul în care se alege o singură variantă, se va șterge tabelul aferent celeilalte opțiuni, iar opțiunea păstrată va fi numerotată cu 6.



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

Responsabilități și autonomie	Studentul are capacitatea de a rezolva independent probleme specifice acestui domeniu și de a utiliza independent programe de calculator care permit modelarea sistemelor chimice și studii ale reactivității.
--------------------------------------	--

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	Familiarizarea cu noțiuni de bază, conceptele și tehnicile din chimia cuantică.
7.2 Obiectivele specifice	- Cunoștințe teoretice de bază și aplicate în chimia cuantică. - Dezvoltarea capacității de a rezolva probleme din acest domeniu.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Introducere. Istoria teoriei cuantice.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.2. Mecanica cuantică. Operatori și postulatele mecanicii cuantice.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.3. Mecanica cuantică: Ecuația lui Schrodinger. Soluțiile ecuației.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.4. Mecanica cuantică: Principiul incertitudinii și tunelarea cuantică.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.5. Mecanica cuantică: moment angular.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.6. Forțe fundamentale și interacțiunea de schimb.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.7. Construirea funcției de undă: seturi de bază și metode de initial guess.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.8. Modelarea Hamiltonianului: metoda Hartree-Fock.	Prelegerea Explicația	Fond de timp alocat = 2 ore



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

	Conversația Demonstrația	
8.1.9. Modelarea Hamiltonianului: metode semiempirice.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.10. Modelarea Hamiltonianului: interacțiunea configurațională și metode multireference.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.11. Modelarea Hamiltonianului: metoda clusterilor cuplați.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.12. Modelarea Hamiltonianului: teoria funcționalelor de densitate.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.13. Variațional versus perturbational.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.14. Mecanica moleculară și metodologia QM/MM.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
Bibliografie Mecanică cuantică: 1. Peter Atkins, Ronald Friedman, <i>Molecular Quantum Mechanics</i> , 5 th edition, Oxford University Press, Oxford, UK, 2011. 2. Wolfgang Pauli, <i>General Principles of Quantum Mechanics</i> , translated by Achutan P. and Venkatesan K., Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1980. 3. Paul A.M. Dirac, <i>The Principles of Quantum Mechanics</i> , 4th edition, Snowball Publishing, 1957. 4. Linus Pauling, E. Bright Wilson, <i>Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry</i> , (reprinted by) Dover Publications, New York, USA, 2015. 5. Malcolm Longair, <i>Quantum Concepts in Physics</i> , Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2013. 6. Malcolm Longair, <i>Theoretical Concepts in Physics</i> , 3 rd edition, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2020. Chimie cuantică: 7. Lucjan Piela, <i>Ideas of Quantum Chemistry</i> , 2 nd edition, Elsevier, 2014. 8. Christopher J. Cramer, <i>Essentials of Computational Chemistry</i> , 2 nd , John Wiley & Sons Ltd, UK, 2004. 9. Attila Szabo, Neil S. Ostlund, <i>Modern Quantum Chemistry</i> , republished by Dover Publications, INC, Mineola, New York, USA, 2015. 10. Mihai V. Putz, Fania Cimpoesu, Marilena Ferbinteanu, <i>Structural Chemistry</i> , Springer, 2018. 11. Bjorn O. Roos, Roland Lindh, Per Ake Malmqvist, Valera Veryazov, Per-Olof Widmark, <i>Multiconfigurational Quantum Chemistry</i> , John Wiley & Sons Ltd, 2016. 12. Isaiah Shavitt, Rodney J. Bartlett, <i>Many-Body Methods in Chemistry and Physics</i> , Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2009. 13. Eberhard Engel, Reiner M. Dreizler, <i>Density Functional Theory- An Advanced Course</i> , Springer, 2011.		
8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
8.2.1. Concepte matematice preliminare. Numere Complexe. Matrici. Vectori. Funcții ortogonale.	Explicația Conversația Problematizarea Exercitiul	Fond de timp alocat = 2 ore



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

8.2.2. Notăția Dirac $\langle \text{bra} c \text{ket} \rangle$. Principiul Superpoziției	Explicația Conversația Problematizarea Exercițiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.3. Oscilatorul Planck.	Explicația Conversația Problematizarea Exercițiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.4. Sistemul de măsurare de unități atomice.	Explicația Conversația Problematizarea Exercițiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.5. Suprafețe de energie potențială.	Explicația Conversația Problematizarea Exercițiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.6. Executarea de calcule semiempirice.	Explicația Conversația Problematizarea Exercițiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.7. Executarea de calcule HF și DFT.	Explicația Conversația Problematizarea Exercițiul	Fond de timp alocat = 2 ore
Bibliografie 1. Thomas F. Jordan, <i>Quantum Mechanics in Simple Matrix Form</i> , republished by Dover Publications, Mineola, New York , USA, 2005. 2. Thomas F. Jordan, <i>Linear Operators for Quantum Mechanics</i> , republished by Dover Publications, Mineola, New York , USA, 2006. 3. Jay M. Anderson, <i>Mathematics for Quantum Chemistry</i> , republished by Dover Publications, Mineola, New York , USA, 2005. 4. Fiona Dickinson, Andrew McKinley, <i>Contextual Maths in Chemistry</i> , Royal Society of Chemistry, 2021..		

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

- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina **Introducere în Chimie Cuantică**, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele din Suplimentul la diploma și calificările din ANC.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la curs	Examen scris.	80%



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY
TRADITIO ET EXCELLENTIA

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581



Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică

Str. Arany János nr. 11
Cluj-Napoca, cod poștal 400028
Tel.: 0264-59.38.33
Fax: 0264-59.08.18

secretariat.chem@ubbcluj.ro
www.chem.ubbcluj.ro

10.5 Seminar/laborator	Capacitatea de a aplica cunostintele dobandite in diverse cazuri (probleme si exercitii)	Teme pentru acasa date la seminar.	20%
10.6 Standard minim de performanță			
- Cunoașterea noțiunilor de bază de chimie cuantică. - Nota 5 (cinci) ca medie ponderată a notelor obținute examenul scris și la temele de seminar (conform subpunctelor 10.4 si 10.5).			

11. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)²



Data completării:
20.1.2025

Semnătura titularului de curs
Conf. dr. habil. Alexandru Lupan

Semnătura titularului de seminar
Conf. dr.habil Alexandru Lupan

.....

Data avizării în departament:

Semnătura directorului de departament
Prof. dr. ing. habil. Graziella Liana Turdean

.....

² Păstrați doar etichetele care, în conformitate cu [Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic](#), se potrivesc disciplinei și ștergeți-le pe celelalte, inclusiv eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă - dacă nu se aplică. Dacă nicio etichetă nu descrie disciplina, ștergeți-le pe toate și scrieți "Nu se aplică".