FIŞA DISCIPLINEI

Chimie computaţională

Anul universitar 2025-2026

1. Date despre program

1.1. Instituţia de învăţământ superior	Universitatea Babeş-Bolyai
1.2. Facultatea	Chimie şi Inginerie Chimică
1.3. Departamentul	Şcoala Doctorală de Chimie
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclul de studii	Doctorat
1.6. Programul de studii / Calificarea	Doctorat/ Doctor în Chimie
1.7. Forma de învăţământ	Frecvenţa

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	**Chimie Computaţională**			Codul disciplinei	**SDC-19-10**
2.2. Titularul activităţilor de curs	Conf. dr. Alexandru Lupan				
2.3. Titularul activităţilor de seminar	Conf. dr. Alexandru Lupan				
2.4. Anul de studiu	1	2.5. Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	Examen
2.7. Regimul disciplinei	Opţional		2.8. Tipul disciplinei		Disciplină de specializare (DS)

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

3.1. Număr de ore pe săptămână	3	din care: 3.2. curs	1	3.3. seminar/ laborator/ proiect	2
3.4. Total ore din planul de învăţământ	36	din care: 3.5. curs	12	3.6 seminar/laborator	24
Distribuţia fondului de timp pentru studiul individual (SI) şi activităţi de autoinstruire (AI)					**ore**
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie şi notiţe (AI)					40
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate şi pe teren					40
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii şi eseuri					40
Tutoriat (consiliere profesională)					10
Examinări					4
Alte activităţi					-
3.7. Total ore studiu individual (SI) şi activităţi de autoinstruire (AI)				**214**	
3.8. Total ore pe semestru				**250**	
3.9. Numărul de credite				**10**	

4. Precondiţii (acolo unde este cazul)

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

5. Condiţii (acolo unde este cazul)

5.1. de desfăşurare a cursului	-
5.2. de desfăşurare a seminarului/ laboratorului	-

6.1. Competenţele dobândite în urma absolvirii programului de studii[1]

[1] Se vor prelua din Planul de învăţământ al programului de studii acele competenţe profesionale şi/sau transversale la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fişa disciplinei. Pentru fiecare competenţă se va prelua întregul enunţ, inclusiv codul competenţei, cu formularea care apare în planul de învăţământ, fără modificări. Dacă nu se preia nici o competenţă din oricare din cele două categorii, se şterge linia din tabel aferentă acelei categorii.

Competenţe profesionale	
Codul competenţei	**Competenţă**
CP1	Definirea noţiunilor, conceptelor, teoriilor şi modelelor avansate în domeniul chimiei computaţionale, precum şi utilizarea lor corectă în comunitatea profesională.
CP4	Utilizarea cunoştinţelor aprofundate de chimie pentru a explica şi interpreta instrumente şi procese specifice chimiei computaţionale.
CP5	Identifying and applying advanced concepts, methods and theories to solve problems specific to computational chemistry
Competenţe transversale	
Codul competenţei	**Competenţă**
CT2	Execution of the requested tasks according to the specified requirements and within the imposed deadlines, in compliance with the norms of professional ethics and moral conduct, following a pre-established work plan
CT3	Solving the requested tasks in accordance with the general objectives established by integration within a working group

6.2. Rezultatele învăţării specifice programului de studii[2]

Rezultatele învăţării vizate prin disciplină		
Codul competenţei	**Cunoştinţe şi înţelegere (Knowledge and understanding)**	**Abilităţi academice specifice (Specific academic skills)**
CP1	Cunoştinţe avansate şi actualizate în chimie şi domeniul cercetării; înţelegere critică a literaturii ştiinţifice.	Integrează şi aplică concepte/teorii avansate pentru formularea ipotezelor de cercetare; argumentează alegerea abordărilor ştiinţifice.
CP4	Advanced research methodologies: experimental design, modern synthesis and characterization techniques, analysis and validation; principles of research project management.	Proiectează, planifică şi implementează un proiect de cercetare; aplică proceduri de calitate şi siguranţă şi documentează trasabil etapele şi datele.
CP5	Advanced strategies for data analysis, interpretation, and integration; evaluation of methodological limitations, reproducibility, and scientific impact.	Analizează critic date complexe, estimează gradul de incertitudine şi formulează concluzii; propune îmbunătăţiri metodologice şi direcţii de cercetare/inovare.
CT2	Scientific terminology and communication in Romanian and English; the structure of scientific articles and presentations; good citation practices.	Redactează şi prezintă coerent rezultate ştiinţifice în româna şi engleză; răspunde argumentat la observaţii şi la recenzii
CT3	Digital tools for research, citation, and data processing (databases, specialized software, reference managers); responsible use of digital resources.	Utilizează eficient instrumente digitale specifice; gestionează citările; foloseşte responsabil resurse informatice în activitatea de cercetare.

7. Rezultatele disciplinei învăţării specifice

Cunoştinţe şi înţelegere (Knowledge and understanding)
1. Aplicarea conceptelor şi teoriilor din domeniul chimiei computaţionale pentru dezvoltarea de proiecte şi rezolvarea problemelor
2. Capacitatea de a înţelege şi interpreta date complementare pentru caracterizarea compuşilor şi proceselor chimice, de a exprima şi argumenta interpretarea datelor pe baza corelării rezultatelor şi a comparării cu datele din literatura de specialitate
3. Analiza critică şi utilizarea metodelor şi tehnicilor avansate pentru evaluarea cantitativă şi calitativă a noţiunilor de chimie computaţională

[2] Se menţionează rezultatele învăţării specifice programului de studiu la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fişa. Enunţurile, preluate fără modificări din Planul de învăţământ în funcţie de tipul disciplinei (DF/DS/DC) se trec în dreptul competenţei asociate.

8. Conţinuturi

8.1 Curs	**Metode de predare - învăţare**	**Observaţii[3]**
8.1.1. Introducere în chimia computaţională, definirea domeniului, relaţia cu celelalte ramuri ale chimiei	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.2. Suprafeţe de energie potenţială	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.3. Mecanica moleculară	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.4. Orbitali moleculari	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.5. Metode semiempirice	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.6. Metode ab initio şi post Hartree-Fock	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.7. Teoria funcţionalelor de densitate	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.8. Metode hibride QM/MM	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.9. Proprietăţi spectroscopice	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.10. Determinarea distribuţiei de sarcini; potenţiale electrostatice moleculare	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	
8.1.11-12. Aplicaţii în chimia medicinală	Prezentarea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Dezbaterea	

Bibliografie

1. C.J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models, Wiley, 2004.
2. E. Lewars, Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Kluwer Academic Publishers, 2003
3. I. Silaghi-Dumitrescu, D. Horvath, Mecanica Moleculara, Presa Universitara Cluj-Napoca, 1996.
4. L. Piela, Ideas of Quantum Chemistry, 2nd edition, Elsevier, 2014.
5. A. Lupan, A.M.V. Brânzanic, R. Silaghi-Dumitrescu, Elemente de chimie computaţională, Presa Universitară Clujeană, Cluj-Napoca, 2024

8.2 Seminar / laborator	**Metode de predare - învăţare**	**Observaţii**
8.2.1. Pachete software în chimie computaţională; elemente de bază ale arhitecturii şi manipulării fişierelor	Conversaţia, Învăţarea prin descoperire, Rezolvarea problemelor	
8.2.2-3. Construction, editing, import, export of models / (bio) molecules; quality criteria	Conversaţia, Învăţarea prin descoperire, Rezolvarea problemelor	
8.2.4. Tipuri de calcule şi metode în cele mai comune pachete software; alegerea metodologiei de calcul	Conversaţia, Învăţarea prin descoperire, Rezolvarea problemelor	
8.2.5-6. Calcule single-point, optimizări geometrice, elemente de conformaţie; criterii pentru evaluarea succesului procedurii	Conversaţia, Învăţarea prin descoperire, Rezolvarea problemelor	
8.2.7-8. Calcule ale proprietăţilor moleculare şi supramoleculare	Conversaţia, Învăţarea prin descoperire, Rezolvarea problemelor	
8.2.9-10. Calcule ale reactivităţii şi stărilor de tranziţie	Conversaţia, Învăţarea prin descoperire, Rezolvarea problemelor	
8.2.11-12 Calcule pe sisteme biologice, situsurilor active	Conversaţia, Învăţarea prin descoperire, Rezolvarea problemelor	

[3] De exemplu aspecte organizatorice, recomandări pentru studenţi, aspecte specifice legate de curs/seminar cum ar fi invitarea unor practicieni în domeniu etc.

Bibliografie
1. C.J.Cramer, Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models, Wiley, 2004.
2. E.Lewars, Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Kluwer Academic Publishers, 2003
3. I.Silaghi-Dumitrescu, D. Horvath, Mecanica Moleculara, Presa Universitara Cluj-Napoca, 1996.
4. F.Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999.
5. A. Lupan, A.M.V. Brânzanic, R. Silaghi-Dumitrescu, Elemente de chimie computațională, Presa Universitară Clujeană, Cluj-Napoca, 2024.
6. A. Lupan, A. Attia, Sz. Jákó, A.-Z.s Kun, R. B. King, Beyond the Wade-Mingos rules: deviations from sphericality in metallaborane structures, Structure and Bonding, 2021, 139.
7. H. Casian, A. Lupan, R. B. King, High-spin face-capped deltahedra in divanadadicarbaboranes are very different from the singlet structures of chromium analogues. Dalton Trans., 2025, 54, 12463.
8. N. Garrido, A. Pitto-Barry, J. J Soldevila-Barreda, A. Lupan, L. C. Boyes, W. Martin, N. Barry, The sound of chemistry: translating infrared wavenumbers into musical notes, J. Chem. Educ., 2020, 97, 703.

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare[4]	9.2 Metode de evaluare[5]	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – înțelegerea și învățarea corectă a noțiunilor și conceptelor discutate în timpul cursurilor; Utilizarea corectă a conceptelor învățate în contexte noi.	Raport scris cu interpretarea lucrărilor practice	50%
	Rezolvarea corectă a problemelor din cadrul subiectelor de examen		
9.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – înțelegerea și învățarea corectă a noțiunilor și conceptelor discutate în timpul cursurilor; Utilizarea corectă a conceptelor învățate în contexte noi.	Raport scris cu interpretarea lucrărilor practice	50%
	Calitatea rapoartelor scrise		
9.6 Standard minim de promovare Cunoașterea adecvată a cel puțin unei tehnici pentru fiecare modul.			

10. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)[6]

		Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă

[4] Criteriile de evaluare trebuie să reflecte direct rezultatele învățării vizate la nivel de program de studii, respectiv la nivel de disciplină. Mai concret, se evaluează achizițiile de învățare menționate în rezultatele anticipate ale învățării.

[5] Se recomandă stabilirea atât a metodelor de evaluare finală, cât și a strategiei de evaluare pe parcurs.

[6] Selectați o singură etichetă, cea care, în conformitate cu *Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic*, se potrivește cel mai bine disciplinei. Dacă disciplina tratează tema dezvoltării durabile la modul general (de ex. prin prezentarea/introducerea cadrului general al dezvoltării durabile etc.) atunci se poate aloca eticheta generală de Dezvoltare Durabilă. Dacă niciuna dintre etichete nu descrie disciplina, selectați ultima opțiune: „*Nu se aplică nici o etichetă*”.

								
			X					
								Nu se aplică nici o etichetă

Data completării:

28.01.2026

Semnătura titularului de curs



Semnătura titularului de seminar



Data avizării în CSDC:

...

Semnătura directorului SDC

Prof. dr. Niculina Daniela Hădade

