



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

A TANTÁRGY ADATLAPJA

Mesterséges intelligencia alkalmazásai a kémiában

Egyetemi tanév 2026/2027

1. A képzési program adatai

1.1. Felsőoktatási intézmény	Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár
1.2. Kar	Kémia és Vegyészmérnöki Kar
1.3. Intézet	Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet
1.4. Szakterület	Kémia és Fizika
1.5. Képzési szint	Alapképzés
1.6. Tanulmányi program/ Képesítés	Kémia–fizika / okleveles vegyész és fizikus
1.7. Képzési forma	Nappali tagozott

2. A tantárgy adatai

2.1. A tantárgy neve	<i>Digitális eszközök a kémiában</i>			A tantárgy kódja	CLM1011
2.2. Az előadásért felelős tanár neve	Conf.Dr. Katona Gabriel				
2.3. A szemináriumért felelős tanár neve	Conf.Dr. Katona Gabriel				
2.4. Tanulmányi év	III	2.5. Félév	6	2.6. Értékelés módja	Vizsga
2.7. Tantárgy rendszere	Kötelező			2.8. Tantárgy típusa	Szaktárgy

3. Teljes becsült idő (az oktatási tevékenység féléves óraszám)

3.1. Heti óraszám	3	melyből: 3.2. előadás	2	3.3. szeminárium/labor/projekt	1
3.4. Tantervben szereplő összórászám	42	melyből: 3.5. előadás	28	3.6. szeminárium/labor	14
3.5 Az egyéni tanulmányi idő (ET) és az önképzési tevékenységekre (ÖT) szánt idő elosztása:					óra
3.5.1. A tankönyv, a jegyzet, a szakirodalom vagy saját jegyzetek tanulmányozása (ET)					30
3.5.2. Könyvtárban, elektronikus adatbázisokban vagy terepen való további tájékozódás					25
3.5.3. Szemináriumok/ laborok, házi feladatok, portfóliók, referátumok, esszék kidolgozása (nagyobb vagy egyenlő a tantárgy naptárában az ellenőrzési feladatokra előírt összórászámával)					18
3.5.4. Egyéni készségfejlesztés (tutorálás)					4
3.5.5. Vizsgák					6
3.5.6. Más tevékenységek: [pl.: kétértelmű kommunikáció a tárgyfelelőssel/ tutorral]					0
3.7. Egyéni tanulmányi idő (ET) és önképzési tevékenységekre (ÖT) szánt idő összórászám					83
3.8. A félév összórászám					125
3.9. Kreditszám					5

4. Előfeltételek (ha vannak)

4.1. tantervi	
4.2. kompetenciabeli	



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

5. Feltételek (ha vannak)

5.1. Az előadás lebonyolításának feltételei	Prezentációkhoz szükséges technikai eszközök (számítógép, megfelelő szoftver, videóprojektor / interaktív tábla). A hallgatók minden előadás előtt kötelesek áttanulmányozni a rendelkezésükre bocsátott elektronikus tananyagot. A hallgatók kötelesek a kurzusokon mobiltelefonjaikat néma üzemmódban tartani.
5.2. A szeminárium/ labor lebonyolításának feltételei	A szemináriumi és laboratóriumi foglalkozásokon való részvétel kötelező, a hatályos szabályzatnak megfelelően. A hallgatók kötelesek a szemináriumokon/laboratóriumi foglalkozásokon mobiltelefonjaikat néma üzemmódban tartani. Késés nem megengedett. A hallgatók kötelesek a laboratóriumba köpenyben, kesztyűben, védőszemüvegben és laboratóriumi törülközővel megjelenni. A hallgatók kötelesek betartani a munkavédelmi előírásokat. Minden laboratóriumi foglalkozás elején a hallgatók teszt kitöltésével igazolják a felhasznált anyagok kockázati tényezőinek és a biztonsági intézkedéseknek, valamint a laboratóriumi gyakorlatnak az ismeretét a rendelkezésre bocsátott szakirodalom alapján. A hallgatók nem hagyhatnak felügyelet nélkül működő berendezést. A laboratóriumi foglalkozás során a hallgatók kötelesek a megfigyeléseiket a laboratóriumi jegyzetfüzetbe rögzíteni. A laboratóriumi jegyzőkönyv leadása a félév elején meghatározott ütemezés szerint történik. Élelmiszer bevitele a laboratóriumba tilos.

6.1. A tanulmányi program elvégzése során elsajátított kompetenciák (a tantervből kell átvenni)¹

Szakmai kompetenciák	
Kompetencia kódja	Kompetencia
CP1	Alkalmazza a kémiai tudományos ismereteket új ismeretek vagy termékek fejlesztésére a minőség és az ellenőrzési folyamat javítása érdekében.
CP2	Tudományos módszereket alkalmaz a kémiai vegyületek összetételének, szerkezetének és fizikai-kémiai tulajdonságainak meghatározására.
CP6	Tudományos eredményeket kommunikál.
CP13	Elősegíti az innovációt és a tudástranszfert.
Transzverzális kompetenciák	
Kompetencia kódja	Kompetencia
CT1	A szakmai feladatok hatékony és felelősségteljes elvégzése a vonatkozó jogszabályok és a szakterületre jellemző etikai normák betartásával, szakképzett felügyelet mellett.
CT2	Tevékenységek végzése multidiszciplináris csapatban, interperszonális kommunikációs készségek alkalmazásával a kitűzött célok elérése érdekében.

¹ A tanulmányi program tantervéből át kell venni azokat a szakmai és/vagy transzverzális kompetenciákat, amelyek fejlesztéséhez az a tantárgy is hozzájárul, amelyhez az adott tantárgyi adatlap készült. Minden kompetencia esetében változatlan formában át kell venni a teljes kijelentést, beleértve a kompetencia kódját is, ahogyan a tantervben megjelenik. Amennyiben a két kategória közül valamelyikből nem vesznek át kompetenciákat, a táblázatban az adott kategóriának megfelelő sort törölni kell.



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

6.2. A tanulmányi programra jellemző képzési eredmények (a tantervből kell átvenni)²

A tantárgy által megcélzott tanulási eredmények		
Kompetencia kódja	Ismeret és megértés (Knowledge and understanding)	Specifikus tudományos készségek (Specific academic skills)
CP1, CP2	A hallgató/végzős hallgató azonosítja, meghatározza és megmagyarázza a kémia alapvető fogalmait (általános, szervetlen, szerves, analitikai és fizikai kémia), amelyeket a szakirodalomban használnak.	A hallgató/végzős hallgató helyesen elemzi és értékeli a kémia alapvető fogalmait, alkalmazza az alapvető elméleteket és koncepciókat a kémiai rendszerek jellemzőinek leírására és értelmezésére.
CP17	A hallgató/végzős hallgató leírja a kémiai laboratóriumokban használt berendezések és műszerek alapelveit és működését.	A hallgató/végzős hallgató munkaprotokollokat dolgoz ki és elemzési jelentéseket készít, megoldásokat azonosít és alternatívákat fogalmaz meg a laboratórium/szakmai egység megfelelő működésének biztosítása érdekében.
CP1, CP13	A hallgató/végzős hallgató azonosítja és alkalmazza azokat a megfelelő információszerzési és dokumentációs módszereket, amelyek szükségesek a kémiai ismeretek megértéséhez és tudományos módon történő közvetítéséhez az érdeklődők felé.	A hallgató/végzős hallgató kiválasztja az információgyűjtés/dokumentáció legmegfelelőbb eredményeit, és azokat világosan és tömören közvetíti az érdeklődők felé.
CP2, CP6	A hallgató/végzős hallgató azonosítja és leírja azokat az alapvető és korszerű kísérleti technikákat, amelyeket a kémiai vegyületek analízisében és jellemzésében alkalmaznak.	A hallgató/végzős hallgató önállóan alkalmaz klasszikus laboratóriumi eszközöket/technikákat és modern berendezéseket, kísérleteket tervez, valamint megfelelően értelmezi és elemzi a kapott eredményeket. A hallgató/végzős hallgató olyan tanulási helyzeteket tervez, amelyek a kémiai laboratóriumokra jellemző kísérleti technikák és módszerek fejlesztésére összpontosítanak.

7. Tárgy-specifikus tanulási eredmények (minden tantárgyfelelős a tanulmányi program szintjének kompetenciáit és tanulási eredményeit összefoglaló táblázatából vezeti be)

Ismeret és megértés (Knowledge and understanding)
A hallgató/végzős hallgató helyesen alkalmazza a kémia alapvető elméleteit és alapelveit oktatási és laboratóriumi környezetben.
A hallgató/végzős hallgató leírja a kémiai laboratóriumokban használt berendezések és műszerek alapelveit és működését.
A hallgató/végzős hallgató kiválasztja az információgyűjtés/dokumentáció legmegfelelőbb eredményeit, és azokat világosan és tömören közvetíti az érdeklődők felé.
Specifikus tudományos készségek (Specific academic skills)
CP1. A hallgató/végzős hallgató helyesen elemzi és értékeli a kémia alapvető fogalmait, alkalmazza az alapvető elméleteket és koncepciókat a kémiai rendszerek jellemzőinek leírására és értelmezésére.

² Meg kell említeni a tanulmányi programra jellemző képzési eredményeket, amelyek fejlesztéséhez az a tantárgy is hozzájárul, amelyhez az adott tantárgyi adatlap készült. A tantárgy típusának (alaptárgy/szaktárgy/kiegészítő tárgy) megfelelő jellemzőket változatlan formában kell átvenni a tantervből, és a kapcsolódó kompetencia jobb oldalán kell feltüntetni.



CP2. A hallgató/végzős hallgató alkalmazza az analitikai kémia, szervetlen kémia, szerves kémia, fizikai kémia, biokémia és anyagtudomány főbb fogalmait a kémiai gyakorlatban.

8. A tantárgy tartalma

8.1 Előadás	Didaktikai módszerek	Megjegyzések ³
Bevezetés a mesterséges intelligenciába	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
A mesterséges intelligencia alapjai	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Kémiai adatok és adatbázisok	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Mesterséges intelligencia az kísérleti adatok elemzésében	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
A molekulák digitális reprezentációja	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Kémiai vegyületek tulajdonságainak előrejelzése mesterséges intelligencia segítségével	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Mesterséges intelligencia a molekulatervezésben	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Mesterséges intelligencia az anyagtervezésben	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Mesterséges intelligencia a katalízisben és a reakcióoptimalizálásban	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Mesterséges intelligencia a számítógépes kémiában	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Mesterséges intelligencia a kémiai folyamatok irányításában	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Generatív mesterséges intelligencia vegyészek számára	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Mesterséges intelligencia a kémiai kutatásban	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Etikai kérdések és a mesterséges intelligencia jövője a kémiában	Előadás. Magyarázat. Megbeszélés. Feladatmegoldás	2 óra hetente
Könyvészet 1 Russell S., Norvig P. <i>Artificial Intelligence: A Modern Approach</i> , 4th Edition, Pearson, 2021. 2 Géron A. <i>Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras & TensorFlow</i> , 3rd Edition, O'Reilly, 2023. 3 Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. <i>Deep Learning</i> , MIT Press, 2016. 4 LeCun Y., Bengio Y., Hinton G. "Deep Learning", <i>Nature</i> , 521, 436–444 (2015). 5 Mater A.C., Coote M.L. "Deep Learning in Chemistry", <i>Journal of Chemical Information and Modeling</i> , 2019.		
8.2 Szeminárium/ Labor	Didaktikai módszerek	Megjegyzések
A mesterséges intelligencia eszközeinek alkalmazása a kémiai tudományos dokumentációban	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	

³ Például szervezési szempontok, ajánlások a hallgatók számára, a kurzushoz/szemináriumhoz kapcsolódó konkrét szempontok, mint például a területen dolgozó szakemberek meghívása stb.



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

Kémiai adatbázisok és a molekulák digitális reprezentációja	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	
Mesterséges intelligencia a kísérleti adatok elemzésében	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	
Kémiai vegyületek tulajdonságainak előrejelzése mesterséges intelligencia segítségével	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	
Mesterséges intelligencia a műszeres analitikában	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	
Mesterséges intelligencia a reakcióoptimalizálásban és a molekulatervezésben	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	
A mesterséges intelligencia alkalmazásai a kémiában	Megbeszélés. Magyarázat. Feladatmegoldás	
Könyvészet 1.Matteo Rupp, O. Anatole von Lilienfeld – Machine Learning for Quantum Chemistry, Springer, 2015 2.Errol Lewars – Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Springer, 2016 3.David C. Young – Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems, Wiley, 2001 4.Steven M. Bachrach – Computational Organic Chemistry, Wiley, 2014 5.Hugh M. Cartwright – Machine Learning in Chemistry, Royal Society of Chemistry, 2020		

9. Értékelés

Tevékenység típusa	9.1 Értékelési kritériumok ⁴	9.2 Értékelési módszerek ⁵	9.3 Aránya a végső jegyben
9.4 Előadás	Írásbeli	Vizsga	100%
9.5 A teljesítmény minimumkövetelményei:			
• 5-ös (ötös) jegy • A laboratóriumi jelenlét legalább 90%-os aránya feltétele a vizsgára bocsátásnak • A félév során készített digitális projekt bemutatása • A kémiában alkalmazott digitális eszközök használatában alapvető kompetenciák bizonyítása			

10. SDG-ikonok (Fenntartható fejlődési célok/ Sustainable Development Goals)⁶

		A fenntartható fejlődés általános ikonja
--	--	--

⁴ Az értékelési kritériumoknak közvetlenül tükrözniük kell a tanulmányi program és a tantárgy szintjén kitűzött képzési eredményeket. Pontosabban, a várható képzési eredményeknél felsorolt eredményeket értékelik.

⁵ Javasolt mind a végső kiértékelési módszerek, mind a folyamatos kiértékelési stratégia meghatározása.

⁶ Válasszon ki egyetlen olyan ikont, amely az *Egyetemi folyamatban történő alkalmazására vonatkozó eljárás* szerint legjobban illeszkedik az adott tantárgyhoz. Ha a tantárgy általánosságban foglalkozik a fenntartható fejlődéssel (pl. bemutatja/bevezeti a fenntartható fejlődés általános kereteit stb.), akkor a Fenntartható Fejlődés általános ikonja rendelhető hozzá. Ha egyetlen ikon sem vonatkozik a tantárgyra, válassza az utolsó opciót: „Nem alkalmazható”.



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



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

Tradiție și Excelență prin
Cultură - Știință - Inovație din 1581

								Nem alkalmazható

Kitöltés időpontja:
17,03,2026

Előadás felelőse:

Szeminárium felelőse:

Az intézeti jóváhagyás dátuma:
27,03,2026

Intézetigazgató: