



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


Structura și dinamica moleculară

Anul universitar 2025-2026

1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai din Cluj Napoca
1.2. Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3. Departamentul	Chimie
1.4. Domeniul de studii	Chimie, Inginerie chimică
1.5. Ciclul de studii	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	CHIMIE AVANSATĂ / master in chimie
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei			Structura și dinamica moleculară				Codul disciplinei	CMR6532
2.2. Titularul activităților de curs			Lect. dr. Ionuț-Tudor Moraru					
2.3. Titularul activităților de seminar			Lect. dr. Ionuț-Tudor Moraru					
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	V	2.7. Regimul disciplinei		Ob\DS

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

3.1. Număr de ore pe săptămână	4	din care: 3.2. curs	2	3.3. seminar/ laborator/ proiect	2
3.4. Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.5. curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					ore
3.5.1. Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					20
3.5.2. Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					15
3.5.3. Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					20
3.5.4. Tutoriat (consiliere profesională)					5
3.5.5. Examinări					4
3.5.6. Alte activități					5
3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					69
3.8. Total ore pe semestru					125
3.9. Numărul de credite					5

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

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



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. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile în modul silențios sau închise • Studenții vor primi copii ale foilor de tip Powerpoint cu materialul de curs în format tipărit înainte de fiecare ședință de curs
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile în modul silențios sau închise • Predarea referatului și rezultatelor de laborator se va face în format electronic și condiționează notarea la această materie

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale/esențiale	<ul style="list-style-type: none"> • Recunoașterea și descrierea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor de modelare moleculară. • Explicarea și interpretarea unor concepte și proprietăți chimice prin intermediul modelării moleculare. • Aplicarea notiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor de chimie prin tehnici de modelare moleculară.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Planificarea, monitorizarea și asumarea sarcinilor profesionale ale unui grup profesional subordonat. Demonstrarea capacității de coordonare a activității, gândire analitică, adaptabilitate și flexibilitate, colaborare cu membrii echipei. • Autoevaluarea performanțelor profesionale proprii și stabilirea nevoilor de formare continuă, informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate și domenii conexe, în corelație cu nevoile pieței muncii.
Responsabilități și autonomie	<ul style="list-style-type: none"> • Studentul are capacitatea de a lucra independent pentru a se achita de sarcini profesionale complexe și de a desfășura autonom activități de cercetare-proiectare, utilizând tehnici asistate de calculator și respectând normele de etică profesională și de conduită morală.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Să familiarizeze studenții cu noțiuni de bază și avansate, concepte, teorii și modele de bază din domeniul chimiei computaționale cu aplicații în chimie și inginerie chimică
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea cunoștințelor pentru îmbunătățirea performanțelor proceselor chimice și biochimice utilizând instrumente asistate de calculator și principii ale dezvoltării durabile • Dobândirea cunoștințelor pentru dezvoltarea și utilizarea modelelor matematice și a simulărilor cu ajutorul unor programe specializate



8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Introducere în modelarea moleculară, definirea domeniului, relația cu celelalte ramuri ale chimiei.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.2. Teoria orbitalilor moleculari (OM); concepte; diagrame de orbitali moleculari.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.3. Grupuri punctuale. Simetria orbitalilor. Diagrame de orbitali moleculari complexe.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.4. Seturi de bază.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.5. Suprafețe de energie potențială (PES).	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.6. Mecanica moleculară (MM).		
8.1.7. Teoria Hückel; metode semiempirice.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.8. Tehnici de calcul <i>ab initio</i> ; metoda Hartree-Fock (HF).	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.9. Metode post Hartree-Fock; Teoria funcționalelor de densitate (DFT).	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.10. Metode hibride QM/MM.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.11. Calculul proprietăților sistemelor moleculare și supramoleculare: determinarea distribuției de sarcină, potențiale moleculare electrostatice, frecvențe vibrationale.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.12. Calculul stărilor de tranziție; analiza mecanismelor de reacție complexe. Aplicații în nanocataliză și cataliza eterogenă.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.13. Calculul stărilor excitate; metoda TD-DFT; aplicații în spectroscopia UV-Vis și dicroism circular (CD).	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.14. Dinamică moleculară. Aplicații.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
Bibliografie 1. C. J. Cramer, <i>Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models</i> , Wiley, 2004. 2. E. Lewars, <i>Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics</i> , Kluwer Academic Publishers, 2003. 3. I. Silaghi-Dumitrescu, D. Horvath, <i>Mecanica Moleculara</i> , Presa Universitara Cluj-Napoca, 1996. 4. F. Jensen, <i>Introduction to Computational Chemistry</i> , Wiley, 1999. 5. J. M. M. Haile, <i>Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods</i> , John Wiley&Sons, N. Y., 1997.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Prezentarea lucrărilor; cerințe, mod de întocmire referate. Noțiuni introductive. Construirea de modele moleculare pe calculator utilizând software-ul <i>Spartan</i> .	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	Lucrările de laborator se organizează din două în două săptămâni (4 ore)
8.2.2 Construirea de modele moleculare pe calculator utilizând software-ul <i>GaussView</i> . Optimizarea geometriei și calculul energiei moleculare (metode semiempirice și <i>ab-initio</i>).	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	



8.2.3 Modelarea geometriei unor compleși moleculari și clusteri metalici utilizând calcule DFT.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.4. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.5 Sisteme complexe implicând mai mult decât o moleculă; arhitecturi supramoleculare și nanoparticule.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.6. Modelarea reactivității chimice: calculul stărilor de tranziție și a mecanismelor de reacție.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.7. Simulări de dinamică moleculară.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	

Bibliografie

1. W. J. Hehre, A. J. Shusterman, W. W. Huang, *A laboratory Book of Computational Organic Chemistry*, Wavefunction, Irvine, California, 1996.
2. E. Lewars, *Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, Kluwer Academic Publishers, 2003.

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 Modelare și design molecular studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță 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 problematicei tratate la curs	Examen scris – notarea este condiționată de efectuarea activităților de laborator Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	70%
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	Notarea se face pe baza raportului scris și a prezentărilor orale bazate pe datele obținute.	30%
	Calitatea referatelor pregătite		



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

	Activitatea desfășurată în laborator		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">Nota 5 (cinci).Cunoașterea noțiunilor introductive; aplicarea metodelor de modelare supra unui material căruia i se cunoaște compoziția chimică, identificând proprietățile ce pot fi prezise și nivelul de precizie/utilitate al metodelor aplicate			

Data completării:
15.03.2025

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

Data avizării în departament:
15.04.2025

Semnătura directorului de departament