



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

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 și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclul de studii	Licență
1.6. Programul de studii / Calificarea	Chimie/Chimist
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei			Topologie moleculara				Codul disciplinei	CLM1160
2.2. Titularul activităților de curs			Conf.Dr. Gabriel Katona					
2.3. Titularul activităților de seminar/laborator			Conf.Dr. Gabriel Katona					
2.4. Anul de studiu	III	2.5. Semestrul	6	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	<b>4</b>	din care: 3.2. curs	<b>2</b>	3.3. seminar/ laborator/ proiect	<b>2</b>
3.4. Total ore din planul de învățământ	<b>56</b>	din care: 3.5. curs	<b>28</b>	3.6 seminar/laborator	<b>28</b>
<b>Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)</b>					<b>ore</b>
3.5.1. Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					25
3.5.2. Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					12
3.5.3. Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					25
3.5.4. Tutoriat (consiliere profesională)					4
3.5.5. Examinări					3
3.5.6. Alte activități: comunicare bidirecțională cu titularul de disciplină					-
<b>3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)</b>				<b>69</b>	
<b>3.8. Total ore pe semestru</b>				<b>125</b>	
<b>3.9. Numărul de credite</b>				<b>5</b>	

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

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

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>



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

	<ul style="list-style-type: none"><li>• Studenții se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator.</li><li>• Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune</li><li>• Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării</li><li>• Pentru predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi</li><li>• Este interzis accesul cu mâncare în laborator</li></ul>
--	--

#### 6.1. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale/esențiale	<ul style="list-style-type: none"><li>• Operarea cu noțiuni de teoria grafurilor și chimie matematică</li><li>• Abilitatea de a utiliza diferitele matrici topologice și indici în prelucrarea statistică a datelor</li><li>• Capacitatea de a utiliza noțiuni de bază din chimia matematică în explicarea diferitelor proprietăți fizico-chimice și biologice</li></ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"><li>• Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată</li><li>• Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse.</li><li>• Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională.</li></ul>

#### 6.2. Rezultatele învățării

Cunoștințe	Studentul cunoaște: metode de codificare a structurilor chimice, modele QSPR/QSAR noțiuni de statistică matematică, simetrie și similaritate
Aptitudini	Studentul este capabil să rezolve probleme referitoare la stabilirea relațiilor cantitative structura-proprietăți fizico-chimice, structura-activitate biologică
Responsabilități și autonomie	Studentul are capacitatea de stabili și interpreta diferite aspecte referitoare la crearea modelelor matematice în vederea predicției de proprietăți fizico-chimice și biologice pe baza unei fișe de lucru.



## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

<b>7.1 Obiectivul general al disciplinei</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dobândirea cunoștințelor teoretice privind chimia matematica, dezvoltarea capacității de rezolvare de probleme.</li> </ul>
<b>7.2 Obiectivele specifice</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Acumularea de cunoștințe teoretice de specialitate prin învățarea, înțelegerea și aplicarea conceptelor legate de chimia matematica reactie</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Noțiuni introductive. Definiții în teoria grafurilor	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.2. Matrici topologice	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.3. Indici topologici	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.4. Indici Cluj si Szeged	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.5. Matrici strat	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.6 Simetrie si similaritate	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.7. Structuri inalt simetrice	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.8. Rețele neuronale	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.9. Notiuni de statistica matematica	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.10. Relatii cantitative structura-proprietati fizico-chimice	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.11. Relatii cantitative structura-activitate biologica	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea.	2 ore / săptămână
8.1.12. Izomorfism si automorfism	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.13. Nanostructuri de carbon	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
8.1.14. Aplicatii ale grafurilor in chimie	Prelegerea. Explicația. Conversația. Problematizarea. Dezbateră	2 ore / săptămână
<b>Bibliografie</b> 1. Suportul de curs (format .pdf) 2. M.V. Diudea, Topologie moleculară, Ed. Compres, 1995. 3. M. V. Diudea, (Ed.), QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors, NOVA SCIENCE, New York, 2001., 438p. 4. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, Molecular Topology, NOVA SCIENCE, New York, 2002. , 329p. 5. O. M. Minailiuc, M. V. Diudea, TI-MTD Model. Applications in Molecular Design. In : M. V. Diudea, Ed., QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors. NOVA SCIENCE, New York, 2001, pp. 363-388.		



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 Seminar / laborator	Metode de predare	Observatii
Utilizarea programelor de calcul	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția matricilor topologici	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția matricilor strat	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția indicilor	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Construcția indicilor extinsi	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Analiza statistică a datelor	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Corelații mono și multivariabile	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Relații QSPR	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Relații QSAR	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Matrici extinsi cu proprietăți	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Realizare de structuri simetrice	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Similarități moleculare. Aplicații	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Rețele neuronale. Aplicații	Explicația; Problematizarea; Conversația;	
Bibliografie 1. M.V. Diudea, Topologie moleculară, Ed. Compres, 1995. 2. M. V. Diudea, (Ed.), QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors, NOVA SCIENCE, New York, 2001., 438p. 3. M.V. Diudea; I. Gutman; L. Jäntschi, Molecular Topology, NOVA SCIENCE, New York, 2002. , 329p. 4. O. M. Minailiuc, M. V. Diudea, TI-MTD Model. Applications in Molecular Design. In : M. V. Diudea, Ed., QSPR/QSAR Studies by Molecular Descriptors. NOVA SCIENCE, New York, 2001, pp. 363-388.		

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

Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator <ul style="list-style-type: none"> <li>Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplină, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS.</li> </ul>
---



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. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	<p>Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la curs.</p> <p>Modul de gândire, corectitudinea și argumentarea soluțiilor problemelor și exercițiilor.</p>	<p><b>Examen scris</b> – condiționat de susținerea colocviului de laborator (min. nota 5). Intenția de fraudă și/sau fraudă la oricare dintre examinări se pedepsește conform Codului de etică și deontologie profesională al UBB.</p>	80%
10.5 Seminar/laborator	<p>Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar.</p> <p>Calitatea referatelor pregătite și activitatea desfășurată în laborator.</p>	<p>Prezența la seminar în proporție de min. 90% condiționează accesul la examen Colocviu-accesul este condiționat de efectuarea lucrărilor de laborator în proporție de 100% și prezentarea fișelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice (care se predau în următoarea săptămână de activitate didactică) -susținerea colocviului de laborator cu minim nota 5 (cinci) și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Colocviu laborator – test –se susține în ultima săptămână de activitate didactică.</p>	20%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>Nota 5 (cinci) atât la examen cât și la activitățile de laborator, conform baremului.</li> </ul>			

Data completării:  
15.03.2025

Semnătura titularului de curs

... ...

Semnătura titularului de seminar

... ...

Data avizării în departament:  
15.03.2025

Semnătura directorului de departament