



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGETEM
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

STRUCTURĂ ȘI DINAMICĂ MOLECULARĂ

ANUL UNIVERSITAR: 2025-2026

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Univeristatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Departamentul de Chimie si Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	TMSC
1.7 Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei			Structură și dinamică moleculară				Codul disciplinei	CMM 6631
2.2. Titularul activităților de curs			Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál					Nu se aplică
2.3. Titularul activităților de seminar			Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál					
2.4. Anul de studiu	1	2.5. Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7. Regimul disciplinei	DF	

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	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:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					38
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					20



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGETEM
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

Tutoriat	2
Examinări	3
Alte activități:	
3.7 Total ore studiu individual	83
3.8 Total ore pe semestru	125
3.9 Numărul de credite	5

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none">Nu este cazul
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none">Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none">Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închiseNu va fi acceptată întârzierea
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none">Studentii se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închiseStudentii se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator.Studentii nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiunePredarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrăriiNu va fi acceptată întârziereaEste interzis accesul cu mâncare în laborator

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none">Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesionalăUtilizarea cunoștințelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea fenomenelor inginerestiIdentificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor tipice ingineriei chimice în condiții de asistență calificatăAnaliza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor din ingineria chimicăAplicarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru elaborarea de proiecte profesionale
-------------------------	--



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

Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none">• Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit• Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru• Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.
-------------------------	--

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none">• Familiarizarea studenților cu unele metode de chimie cuantică și de elucidarea relației structură-reactivitate chimică.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none">• Metode de aproximări în chimia cuantică.• Metoda variațională.• Metoda perturbatională.• Reactivitate chimică.• Aprecierea reactivității chimice funcție de structura moleculară.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Metode exacte și metode bazate pe aproximări <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> Ecuația lui Schrödinger, Spinul electronului, determinantul Slater.	Prelegerea Explicația, Conversația	
8.1.2. Metoda OM a lui Huckel. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> sisteme de legături π . Sisteme localizate, sisteme delocalizate. Exemplul etenei.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.3. Aplicații de calcul prin metoda Huckel. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> butadiena calculul coeficienților prin metoda van Fleck.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.4 Aplicații de calcul pe baza simetriei moleculare. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> benzenul, hidrocarburi alternante și h. nealternante	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	



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

8.1.5. Sisteme delocalizate cu heteroatomi. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> piridina, aproximarea integralelor	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.6. Metoda Huckel perfectionata <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> polaritatea legăturii; moment dipolar;	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.7. Metoda polarizabilităților <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> ecuația Coulson.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.8. Calculul unor integrale moleculare <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> integrale de acoperire pentru orbitali Slater, orbitale GTO	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.9 Evaluări semiempirice în teoria OM <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> termeni monoelectronici, termeni multielectronici	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.10. Formule aproximative pentru termenii multielectronici <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> formalismul hamiltonianului monoelctronic efectiv, pastrarea invariatiei.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.11 Calculul prin procedee semiempirice de OM a unor proprietati fizico-chimice <i>Concepte de bază, cuvinte cheie:</i> Teorema Hellmann-Feynmann , geometria de echilibru.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12. Constante de forta din studii MO <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> calduri de formare, atomizare.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	



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

8.1.13. Aplicarea metodelor semiempirice de MO în studiul tranzițiilor spectrale. <i>Concepte de bază, cuvinte cheie:</i> intensitati IR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Calculul de constante de scindare hiperfina, studiul constantelor de ecranare <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> RES, RMN.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie 1. P.W.Atkins, J.de Paula, <i>Physical Chemistry</i> , 7 th Ed., Oxford, 2002. 2. I. Zsakó, <i>Chimie Fizică</i> , EDP, București 1973 3. J. Keeler, P. Wothers, <i>Chemical Structure and Reactivity</i> , Oxford University Press, 2008. 4. S. Moldoveanu, A.Savin: Aplicații în chimie ale metodelor semiempirice de OM, Ed. Academiei Republicii Socialiste Romania 1980.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Noțiuni de mecanica cuantica. Notari. Constante universale.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea;	
8.2.2. Simetrie moleculara. Determinarea grupului de simetrie a moleculelor.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.3. Determinarea momentelor de dipol ale unor molecule. Polarizație molară; polarizație de deplasare și de orientare; moment de dipol permanent și indus; dielcometrie	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.4. Evaluarea teoretica a spectrelor IR Spectre de rotație; spectre de vibrație; spectre de vibrație-rotație ale moleculelor diatomice; vibrații de valență și de deformare; benzi caracteristice; modelarea spectrelor IR.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.5. Evaluarea teoretica a spectrelor UV-VIZ. Tranziții electronice, nivele electronice, orbitali	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	



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

moleculari, cromofori, tabelul Deslandres.		
8.2.6. Generare teoretica de spectre de difracție Raze Roentgen, difracția prin rețele cristaline, constanta rețelei, interpretarea spectrelor	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.7. Prezentarea programului de calcul Hyperchem.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.8. Calcule HMO pentru sisteme nedelocalizate.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.9. Calcule HMO pentru sisteme delocalizate.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.10. Calcule HMO pentru sisteme cu heteroatomi.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.11. Calcule cu metoda HMO perfectionata.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.12. Calculul constantelor de forță prin metoda MO.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.13. Calcule de tranziții spectrale.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.14. Verificarea cunoștințelor	Test	
Bibliografie		
1.) Z.Andrei, I.Zsako, L.D.Bobos, și col., “ <i>Lucrări practice de termodinamică și structură chimică</i> ”, Ed. UBB, Cluj-Napoca, 1996 .		
2.) Arthur M.Halpern, Experimental Physical Chemistry, 2-nd ed., Prentice-Hall International, London 1997.		

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 **Structură și dinamica moleculară** studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 2 – RNCIS.



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	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	80%
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	Referatele de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice – se predau în ultima săptămână de activitate didactică Colocviu laborator – test – se susține în ultima săptămână de activitate didactică	20%
	Calitatea referatelor pregătite		
	Activitatea desfășurată în laborator		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului.			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

20.03.2025



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

Data avizării în departament

20.03.2025

Semnătura directorului de departament

.

Prof.Dr.Ing. Paizs Csaba
Paizs