



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

### Elemente de modelare moleculară

Anul universitar 2025-26

#### 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	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	Tehnici moderne de sinteza în chimie
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

#### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei			Elemente de modelare moleculară				Codul disciplinei	CMM6634
2.2. Titularul activităților de curs			Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt KUN				4	
2.3. Titularul activităților de seminar			Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt KUN					
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7. Regimul disciplinei	DS	

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

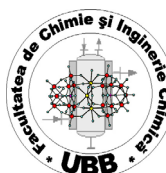
3.1. Număr de ore pe săptămână	4	din care: 3.2. curs	2	3.3. seminar/ laborator/ proiect	2
3.4. Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.5. curs	28	3.6 seminar/laborator	28
<b>Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)</b>					<b>ore</b>
3.5.1. Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					20
3.5.2. Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
3.5.3. Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					23
3.5.4. Tutoriat (consiliere profesională)					9
3.5.5. Examinări					3
3.5.6. Alte activități					-
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	• Cunoștințe de bază în chimie anorganică

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

5.1. de desfășurare a cursului	• Sală prevăzută cu tablă și videoproiector. • Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile
--------------------------------	---



	<p>închise</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Se va stimula participarea interactivă.</li> </ul>
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studenții se vor prezenta la laborator cu echipamentul de protecție și vor respecta normele de protecția muncii conform instructajului.</li> <li>Studenții vor primi în fiecare ședință suportul de laborator (referatul);</li> <li>Completarea / predarea referatelor se face la o săptămână la laboratorul următor;</li> <li>Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune</li> <li>Este interzis accesul cu mâncare/băutură în laborator</li> </ul>
•	În acord cu principiile și valorile promovate, potrivit Codului de Etică al Universității Babeș-Bolyai art. 39, „discriminarea sau tratarea inegală a membrilor comunității universitare, bazată explicit ori implicit pe criterii extraprofesionale precum rasa, sexul, etnia, religia, apartenența la grupuri minoritare, convingerile politice, orientările și preferințele personale etc.” sunt interzise și reprezintă încălcări ale obligațiilor privind dreptatea și echitatea.

#### 6. Competențele specifice acumulate<sup>1</sup>

Competențe profesionale/esențiale	<ul style="list-style-type: none"> <li>C1. Caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>C1.1. Identificarea metodelor adecvate și specifice pentru caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>C1.2. Stabilirea modalităților de atribuire a structurii și corelarea informației oferite de diverse metode</li> <li>C1.3. Utilizarea corectă și adecvată a metodelor specifice de caracterizare structurală a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>C1.4. Analiza critică a metodelor de caracterizare structurală a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>C1.5. Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatura pentru caracterizarea structurală completă a unui reprezentant din clasele de compuși studiate</li> <li>C2. Studiul relației structură –proprietăți în design-ul, obținerea și caracterizarea unor materiale cu diverse aplicații</li> <li>C2.1. Descrierea și utilizarea de concepte, teorii și metode avansate în identificarea particularităților structurale care conferă unor compuși potențial aplicativ</li> <li>C2.2. Stabilirea modalităților teoretice și experimentale de corelare structură-proprietăți</li> <li>C2.3. Utilizarea relației structură-proprietăți în determinarea potențialului aplicativ a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>C2.4. Analiza critică a diverselor abordări teoretice și experimentale în determinarea proprietăților care recomandă un compus/o clasă de compuși pentru utilizarea ca material</li> <li>C2.5. Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatură pentru identificarea relației dintre structură și proprietăți și caracterizarea unui reprezentant cu potențial aplicativ din clasele de compuși studiate</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Executarea sarcinilor solicitate conform cerintelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit</li> <li>Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li> <li>Informarea și documentarea permanentă în domeniul sau de activitate</li> <li>Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate</li> </ul>

<sup>1</sup> Se poate opta pentru competențe sau pentru rezultatele învățării, respectiv pentru ambele. În cazul în care se alege o singură variantă, se va șterge tabelul aferent celeilalte opțiuni, iar opțiunea păstrată va fi numerotată cu 6.



UNIVERSITATEA BABES-BOLYAI  
BABES-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM  
BABES-BOLYAI UNIVERSITÄT  
BABES-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

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

<b>7.1 Obiectivul general al disciplinei</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>Familiarizarea studenților cu noțiuni de bază și avansate, concepte, teorii și modele de bază din domeniul modelării moleculare</li></ul>
<b>7.2 Obiectivele specifice</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>Imbogățirea cunostintelor de chimie structurală, prin adăugarea de noi cunostinte, noi explicații la bagajul deja existent; îmbogățirea limbajului chimic. Utilizarea corectă a noțiunilor de chimie.</li><li>Dobândirea cunoștințelor pentru îmbunătățirea performanțelor proceselor chimice utilizând instrumente asistate de calculator</li><li>Dobândirea cunoștințelor pentru dezvoltarea și utilizarea chimiei cuantice în studiul structurilor moleculare și a proceselor chimice</li><li>Dobândirea cunoștințelor pentru determinarea și interpretarea proprietăților structurale ale compușilor chimici cu ajutorul modelării moleculare.</li></ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
1. Introducere în modelarea moleculară, definirea domeniului, relația cu celelalte ramuri ale chimiei	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Suprafețe de potențial	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Mecanica moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Bazele teoriei orbitalilor moleculari. Seturi de bază	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Metoda MO ab initio Hartree-Fock	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
6. Metode MO semiempirice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
7. Metode MO avansate, post- Hartree-Fock	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Teoria funcționalelor de densitate (DFT).	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
9. Metode hibride QM/MM	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Metode de dinamică moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Calculul proprietăților sistemelor moleculare	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	



UNIVERSITATEA BABES-BOLYAI  
BABES-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM  
BABES-BOLYAI UNIVERSITAT  
BABES-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

12. Calculul proprietăților sistemelor moleculare: Determinarea distribuției de sarcină, potențiale moleculare electrostatice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Calculul stărilor excitate	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Determinarea mecanismelor de reacție prin calculul stărilor de tranziție	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>Bibliografie</b> 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, Mecanică Moleculară, Presa Universitară Cluj-Napoca, 1996. 4. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999. 5. Gy.Tasi Számítógépes kémia, JATEPress Szeged, 2010 6. Mueller M.R. Fundamentals of Quantum Chemistry.. Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computations Kluwer Academic Publishers, 2001		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
1. Prezentarea lucrărilor, cerințe, mod de întocmire a referatelor. Noțiuni recapitulative.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Construirea de modele moleculare pe calculator. Programe utilizate.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul mecanicii moleculare	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor ab initio și semiempirice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Profile energetice. Analiză conformațională.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
6. Metode de analiză a funcției de undă/densității electronice.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
7. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Evaluare	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
9. Stări de tranziție	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Construirea modelelor implicând mai mult decât o moleculă: sisteme supramoleculare, nanosisteme	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Modelarea formei și energiei sistemelor	Experimentul; Explicația;	



UNIVERSITATEA BABES-BOLYAI  
BABES-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM  
BABES-BOLYAI UNIVERSITÄT  
BABES-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

supramoleculare	Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Tehnici dinamice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Evaluare pe parcurs, prezentare referat	Prezentare studiu de literatură	
<b>Bibliografie</b> 1. W. J. Hehre, A. J. Shusterman, W. W. Huang, A laboratory Book of Computational Organic Chemistry, Wavefunction, Irvine, California, 1996. 2. Spartan '06. Tutorial and User Guide, Wavefunction, 2005. 3. Referate de laborator		

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

- Prin însușirea conceptelor teoretice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina Chimia nemetalelor studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevazute în Grila 1 – RNCIS.

**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 – înțelegerea și aplicarea corectă a problematicii tratate la curs  Rezolvarea corectă a exercițiilor și problemelor.	Examen scris – accesul la examen este condiționat de rezolvarea temelor de seminar Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	30%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar. Rezolvarea corectă a temelor pe parcursul semestrului.	Temele de seminar se predau la datele stabilite de comun acord cu studenții. Notarea se face pe baza raportului scris și a datelor din fișiere anexe solicitate pentru activitățile de modelare	30%
10.6 Activități pe parcurs	Rezolvarea sarcinilor practice - cercetare	Întocmirea și prezentarea unui referat pe baza calculelor proprii	40%
10.6 Standard minim de performanță			



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

- Nota 5 (cinci) la examen conform baremului.

## 11. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)<sup>2</sup>

--	--

Data completării:  
19.03.2025

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar.

Data avizării în departament:

...

Semnătura directorului de departament

Prof. habil. dr. ing. Csaba PAIZS

<sup>2</sup> Păstrați doar etichetele care, în conformitate cu [Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic](#), se potrivesc disciplinei și ștergeți-le pe celelalte, inclusiv eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă - dacă nu se aplică. Dacă nicio etichetă nu descrie disciplina, ștergeți-le pe toate și scrieți "Nu se aplică".