



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

### Aspecte moleculare în procese chimice

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	Inginerie chimică
1.5. Ciclu de studii	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	Chimia și ingineria nano- și biomaterialelor
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

#### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei			Aspecte moleculare în procese chimice				Codul disciplinei	CMM8247
2.2. Titularul activităților de curs			Lector dr. Nagy Levente Csaba					
2.3. Titularul activităților de seminar			Lector dr. Nagy Levente Csaba					
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	4	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	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					20
3.5.3. Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și					20
3.5.4. Tutoriat (consiliere profesională)					6
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	• Nu este cazul

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

5.1. de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Sală cu proiector multimedia și ecran de proiecție, sau tablă interactivă.</li> <li>Studentii se prezintă la curs cu telefoanele mobile pe modul silențios.</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

5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Sală cu proiector multimedia și ecran de proiecție, sau tablă interactivă.</li> <li>• Laborator dotat cu calculatoare și software specific.</li> <li>• Nu se permite întârzierea.</li> </ul>
--	---

## 6. Competențele specifice acumulate

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 cerințelor 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 său de activitate</li> <li>• Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.</li> </ul>

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<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>
---------------------------------------	---



<p><b>7.2 Obiectivele specifice</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Îmbogățirea cunoștințelor de chimie structurală, prin adăugarea de noi cunoștințe, 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 compuşilor chimici cu ajutorul modelării moleculare.</li> </ul>
---	---

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1 Prezentarea disciplinei, cunoștințelor și abilităților dobândite, cerințelor pentru promovare. Introducere în modelarea moleculară.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.2 Interacțiuni de legătură (legături, unghiuri, unghiuri diedre). Mecanica moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.3 Suprafața de energie potențială. Analiza conformațională.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.4 Introducere în grafică moleculară. Programe pentru vizualizarea, editarea și analiza structurilor moleculelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.5 Bazele teoriei orbitalilor moleculari. Seturi de bază.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.6 Metode MO ab initio și Hartree-Fock.		
8.1.7 Metode MO semiempirice.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.8 Teoria funcționalelor de densitate (DFT).	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.9 Stări electronice excitate.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.10 Metoda hibridă mecanică cuantică și mecanică moleculară QM/MM.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.11 Modelarea structurii proteinelor pe baza de omologie. Alinierea proteinelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.12 Determinarea mecanismelor de reacție prin calculul stărilor de tranziție.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.13 Metode QSAR/QSPR. 3D-QSAR.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.14 Interacțiuni proteină-ligand. Andocare moleculară.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
<p><b>Bibliografie</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Nagy, L.C. Suport de curs.</li> <li>2. Tasi Gy.; Számítógépes kémia. JATEPress Szeged, 2010.</li> <li>3. Hóltzl T., Veszprémi T.; Kémiai szimulációk az atomoktól a vegyipari reaktorokig. Akadémiai kiadó, 2019.</li> <li>4. Cramer C. J.; Essentials of computational chemistry, theories and models. Wiley, 2004.</li> <li>5. Lewars E.; Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Kluwer Academic Publishers, 2003.</li> </ol>		



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

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1 Prezentarea programelor utilizate. Formate de fișiere pentru modele moleculare.	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.2.2 Construirea de modele moleculare pe calculator.	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
3. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul mecanicii moleculare	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
4. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor ab initio și semiempirice	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
5-6. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
7-8. Construirea modelelor implicând mai mult decât o moleculă; sisteme supramoleculare, nanosisteme	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
9-10. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular și supramolecular	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
11-12. Modelarea formei și energiei sistemelor supramoleculare și a nanosistemelor.	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
13. Tehnici dinamice	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
14. Evaluare	Test	
<b>Bibliografie</b>  1. Foresman J.B., Frisch A.; Exploring chemistry with electronic structure methods. 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015. 2. Hehre W. J., Shusterman A. J., Huang W. W.; A laboratory book of computational organic chemistry, Wavefunction, Irvine, California, 1996. 3. Hinchliffe A.; Molecular modelling for beginners. Wiley, 2008.		

**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 Aspecte moleculare în procese chimice studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute 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 problematicei tratate la curs	Examen oral - prezentarea referatului pe o temă din tematica disciplinei.	50%
	Rezolvarea corectă a exercițiilor și problemelor.		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a	Temele de seminar se predau la datele stabilite.	50%



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

	problematicii tratate la seminar. Rezolvarea corecta a temelor pe parcursul semestrului.		
	Rezolvarea sarcinilor practice		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>Nota 5 (cinci) la examen conform baremului.</li></ul>			

#### 11. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)



Data completării:  
15 martie 2025

Semnătura titularului de curs

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Semnătura titularului de seminar

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Data avizării în departament:  
17 martie 2025

Semnătura directorului de departament

Prof. Habil. dr. ing. PAIZS Csaba