

## FIȘA DISCIPLINEI

### Structura și dinamica moleculară

Anul universitar 2026-2027

#### 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. Ciclu 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	<b>Modelare și design molecular</b>			Codul disciplinei	<b>CME6532</b>
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	Evaluare pe parcurs
2.7. Regimul disciplinei	Opțional		2.8. Tipul disciplinei	Disciplină de specializare (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>
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat (consiliere profesională)					5
Examinări					4
Alte activități					5
<b>3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)</b>				<b>74</b>	
<b>3.8. Total ore pe semestru</b>				<b>130</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	Se va stimula participarea interactivă. Se vor pune la dispoziție materiale și informații utile pentru realizarea activităților. Cursul se va desfășura on site în cadrul Facultății de Chimie și Inginerie Chimică. Utilizarea telefonului sau a altor dispozitive electronice este permisă doar pentru activitățile din cadrul cursului.
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	Prezența la activitățile de seminar este obligatorie în condițiile stabilite prin regulament. Rezolvarea și predarea temelor de la seminar se realizează conform calendarului stabilit la începutul semestrului, de comun acord cadru

	didactic-studenți. Utilizarea telefonului sau a altor dispozitive electronice este permisă doar pentru activitățile din cadrul seminarului.
--	---

#### 6.1. Competențele dobândite în urma absolvirii programului de studii (se preiau din planul de învățământ)<sup>1</sup>

Competențe profesionale	
Codul competenței	Competență
CP1	Formularea soluțiilor de rezolvare a problemelor complexe ale chimiei teoretice și utilizarea tehnicilor de modelare moleculare în studiul sistemele chimice și biochimice pe baza cunoașterii și aplicării conceptelor, metodelor avansate din domeniul chimiei cuantice și computaționale. Formulating solutions to complex problems in theoretical chemistry and using molecular modeling techniques in the study of chemical and biochemical systems, based on the knowledge and application of advanced concepts and methods from quantum and computational chemistry
CP2	Descrierea și utilizarea tehnicilor de modelare moleculare avansate folosite pentru identificarea/explicarea structurii electronice, geometriei, mecanismelor de reacție și a proprietăților spectroscopice, în cazul unor sisteme moleculare și nanoparticule. Description and use of advanced molecular modeling techniques employed to identify and explain the electronic structure, geometry, reaction mechanisms, and spectroscopic properties of molecular systems and nanoparticles.
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT3	Conceperea, planificarea și desfășurarea unui proiect propriu de cercetare științifică multidisciplinar, prin integrarea cunoștințelor din diferitele discipline. Designing, planning and performing an individual scientific, multidisciplinary research project

#### 6.2. Rezultatele învățării specifice programului de studii (se preiau din planul de învățământ)<sup>2</sup>

Rezultatele învățării vizate prin disciplină		
Codul competenței	Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)	Abilități academice specifice (Specific academic skills)
CP1	Formularea soluțiilor de rezolvare a problemelor complexe ale chimiei teoretice și utilizarea modelării moleculare în sistemele chimice și biochimice pe baza cunoașterii, identificării și aplicării conceptelor, metodelor și teoriilor avansate din domeniul chimiei computaționale Formulating solutions to complex problems in theoretical chemistry and applying molecular modeling in chemical and biochemical systems, based on the knowledge, identification, and application of advanced concepts, methods, and theories from computational chemistry	Aplicarea metodelor și tehnicilor moderne din domeniul chimiei computaționale în studiul sistemelor chimice și biochimice Application of modern methods and techniques from computational chemistry in the study of chemical and biochemical systems

<sup>1</sup> Se vor prelua din Planul de învățământ al programului de studii acele competențe profesionale și/sau transversale la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa disciplinei. Pentru fiecare competență se va prelua întregul enunț, inclusiv codul competenței, cu formularea care apare în planul de învățământ, fără modificări. Dacă nu se preia nici o competență din oricare din cele două categorii, se șterge linia din tabel aferentă acelei categorii.

<sup>2</sup> Se menționează rezultatele învățării specifice programului de studiu la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa. Enunțurile, preluate fără modificări din Planul de învățământ în funcție de tipul disciplinei (DF/DS/DC) se trec în dreptul competenței asociate.

<b>CT3</b>	Cunoașterea unor strategii de cercetare științifică, stabilirea programului experimentelor și simulărilor, explicarea și interpretarea rezultatelor pentru elaborarea proiectelor de cercetare Knowledge of scientific research strategies, setting the program of experiments and simulations, explanation and interpretation of the results for the elaboration of research projects	Utilizarea conceptelor fundamentale și aplicative de investigare științifică în scopul dezvoltării de proiecte de cercetare pentru dezvoltarea de noi tehnologii Use of fundamental and applied concepts of scientific investigation in order to develop research projects for the development of new technologies
------------	---	---

## 7. Rezultatele învățării specifice disciplinei

<b>Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)</b>
Studentul cunoaște conceptele și teoriile avansate de chimie computațională și aplicarea lor în domeniul chimiei, biologiei, nanotehnologiei.
Studentul cunoaște și înțelege problemele complexe de structură chimică a sistemelor moleculare și nanometrice analizate
Studentul operează cu noi concepte și teorii referitoare la modelarea și analiza teoretică a unor sisteme chimice și biochimice complexe.
<b>Abilități academice specifice (Specific academic skills)</b>
Studentul analizează și aplică concepte, teorii avansate privind modelarea moleculară a unor sisteme complexe
Studentul utilizează creativ tehnicile chimiei computaționale în proiectarea rațională a unor noi sisteme chimice
Studentul înțelege și evaluează proprietățile spectrale ale unor sisteme complexe pe baza tehnicilor de modelare moleculară

## 8. Conținuturi

<b>8.1 Curs</b>	<b>Metode de predare - învățare</b>	<b>Observații<sup>3</sup></b>
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).	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
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

<sup>3</sup> De exemplu aspecte organizatorice, recomandări pentru studenți, aspecte specifice legate de curs/seminar cum ar fi invitarea unor practicieni în domeniu etc.

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 vibraționale.	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, *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, *Mecanica Moleculară*, Presa Universitară Cluj-Napoca, 1996.
4. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, Wiley, 1999

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare - învățare	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. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare <sup>4</sup>	9.2 Metode de evaluare <sup>5</sup>	9.3 Pondere din nota finală
9.4 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		
9.5 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		
	Activitatea desfășurată în laborator		
9.6 Standard minim de promovare			
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			

## 10. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)<sup>6</sup>

		Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă						
								
								

<sup>4</sup> Criteriile de evaluare trebuie să reflecte direct rezultatele învățării vizate la nivel de program de studii, respectiv la nivel de disciplină. Mai concret, se evaluează achizițiile de învățare menționate în rezultatele anticipate ale învățării.

<sup>5</sup> Se recomandă stabilirea atât a metodelor de evaluare finală, cât și a strategiei de evaluare pe parcurs.

<sup>6</sup> Selectați o singură etichetă, cea care, în conformitate cu [Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic](#), se potrivește cel mai bine disciplinei. Dacă disciplina tratează tema dezvoltării durabile la modul general (de ex. prin prezentarea/introducerea cadrului general al dezvoltării durabile etc.) atunci se poate alocă eticheta generală de Dezvoltare Durabilă. Dacă niciuna dintre etichete nu descrie disciplina, selectați ultima opțiune: „Nu se aplică nici o etichetă”.

10 INEGALITĂȚI REDUSE 	11 ORASE ȘI COMUNITĂȚI DURABILE 	12 CONSUM ȘI PRODUCȚIE RESPONSABILĂ 	13 ACȚIUNE CLIMATICĂ 	14 VIAȚĂ ACVATICĂ 	15 VIAȚĂ TERESTRĂ 	16 PACE, JUSTIȚIE ȘI INSTITUȚII EFICIENTE 	17 PARTENERIAȚE PENTRU REALIZAREA OBIECTIVELOR 	Nu se aplică nici o etichetă
								

Data completării:

17.04.2026

Semnătura titularului de curs

Lect. dr. Ionuț-Tudor Moraru

Semnătura titularului de seminar

Lect. dr. Ionuț-Tudor Moraru

Data avizării în departament:

24.04.2026

Semnătura directorului de departament

Prof. Habil Dr. Ing. Monica Ioana Toșa