

## FIȘA DISCIPLINEI

*Instrumente digitale pentru chimie / Digital tools for chemistry*

Anul universitar 2026-2027

### 1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai
1.2. Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3. Departamentul	Chimie
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclu de studii	Licență
1.6. Programul de studii / Calificarea	Chimie / Licențiat în chimie
1.7. Forma de învățământ	cu frecvență

### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	<b>Instrumente digitale pentru chimie</b>			Codul disciplinei	<b>CLR1068</b>
2.2. Titularul activităților de curs	Conf. Dr. Ciprian I. Raț / Lector Dr. Ionuț T. Moraru				
2.3. Titularul activităților de seminar	Conf. Dr. Ciprian I. Raț / Lector Dr. Ionuț T. Moraru				
2.4. Anul de studiu	1	2.5. Semestrul	1	2.6. Tipul de evaluare	Evaluare pe parcurs
2.7. Regimul disciplinei	Obligativu		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	3	din care: 3.2. curs	1	3.3. seminar/ laborator/ proiect	2
3.4. Total ore din planul de învățământ	42	din care: 3.5. curs	14	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					15
Tutoriat (consiliere profesională)					1
Examinări					2
Alte activități					0
<b>3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)</b>				<b>58</b>	
<b>3.8. Total ore pe semestru</b>				<b>100</b>	
<b>3.9. Numărul de credite</b>				<b>4</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 vor avea la dispoziție suportul de curs în format electronic.</li><li>• Se va stimula participarea interactivă.</li><li>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise.</li></ul>
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	<ul style="list-style-type: none"><li>• Studenții se vor prezenta la laborator cu informațiile referitoare la modul de lucru însușite.</li><li>• Studenții care nu cunosc conținutul lucrării nu vor putea participa la ședința de laborator.</li><li>• Este interzis accesul cu mâncare în laborator.</li><li>• Studenții se vor prezenta la laborator cu telefoanele mobile închise.</li><li>• Se vor respecta regulile și conduita privind utilizarea software-ului și a resurselor digitale.</li></ul>

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

Competențe profesionale	
Codul competenței	Competență
CP10	Convertește, prin intermediul unor modele și simulări computerizate, formulele și constatările de laborator specifice în procese de producție. <i>Converts, through models and computer simulations, specific laboratory formulas and findings into production processes.</i>
CP13	Promovează inovarea și transferul de cunoștințe <i>Promote innovation in research and the transfer of knowledge</i>
CP17	Utilizează software specific și instrumente informatice. <i>Use specific software and IT tools.</i>
CP19	Predă în contexte academice sau profesionale. <i>Teach in academic or vocational contexts.</i>
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT1	Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată. <i>Achievement of professional tasks effectively and responsibly according to the legal regulations and ethics specific to the field under qualified assistance.</i>
CT2	Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse. <i>Implementation of activities in the multidisciplinary team using interpersonal communication skills to accomplish goals.</i>
CT3	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. <i>Effective use of information sources and also of communication and training assisted resources both in the Romanian language and an internationally acknowledged language.</i>

### 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)
CP13, CP19, CT1-CT3	Studentul/absolventul formulează rapoarte științifice și prezintă rezultatele documentării și experimentelor. <i>The student/graduate writes scientific reports and presents the results of documentation and experiments.</i>	Studentul/absolventul aplică principiile științei pentru redactarea și prezentarea unor rapoarte științifice. <i>The student/graduate applies scientific principles to the writing and presentation of scientific reports.</i>
CP17, CP19, CT1-CT3	Studentul/absolventul descrie și integrează cunoștințe specifice și interdisciplinare în activitatea profesională. <i>The student/graduate describes and integrates specific and interdisciplinary knowledge into their professional activity.</i>	Studentul/absolventul aplică metode interdisciplinare adecvate pentru a rezolva probleme chimice complexe, teoretice și practice. <i>The student/graduate applies appropriate interdisciplinary methods to solve complex theoretical and practical chemical problems.</i>
CP10	Studentul/absolventul evaluează natura complexă a relațiilor structură-reactivitate chimică prin corelarea conceptelor de baza de legătură chimică, configurație	Studentul/absolventul realizează experimente și determinări computaționale pentru determinarea relației structură-reactivitate

<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.

	<p>electronică și geometrie moleculară în vederea determinării mecanismelor de reacție, a stabilității și aplicabilităților compușilor chimici.</p> <p><i>The student/graduate evaluates the complex nature of structure-reactivity relationships by correlating concepts of chemical bonding, electronic configuration, and molecular geometry in order to determine reaction mechanisms, stability of compounds, and the applications of chemical compounds.</i></p>	<p>chimică, utilizând datele obținute pentru a anticipa proprietățile fizico-chimice și potențialul de utilizare a unor noi combinații chimice.</p> <p><i>The student/graduate performs both experiments and computational determination in order to stabilise structure chemical reactivity relationships, using the acquired data to predict the physicochemical properties and the potential applications of new chemical compounds.</i></p>
CP17	<p>Studentul/absolventul înțelege și proiectează strategii de analize fizico-chimice prin integrarea tehnicilor analitice de separare cu metodele spectroscopice, computaționale și concepte de chemometrie pentru identificarea, cuantificarea și caracterizarea compușilor chimici.</p> <p><i>The student/graduate understands and designs physico-chemical methodologies by integrating analytical separation techniques with spectroscopic and computational methods, as well as chemometric concepts, for identification, quantification, and characterization of chemical compounds.</i></p>	<p>Studentul/absolventul prelucrează și analizează prin metode spectrochimice probe complexe și validează structuri moleculare prin integrarea rezultatelor experimentale cu modele teoretice generate prin simulări digitale.</p> <p><i>The student/graduate processes and analyzes complex samples using spectrochemical methods and validates molecular structures by integrating experimental results with theoretical models generated through digital simulations.</i></p>
CT1	<p>Studentul/absolventul operează cu terminologia de specialitate în limbi străine, respectând principiile comunicării educaționale.</p> <p><i>The student/graduate demonstrates proficiency in using specialized terminology in foreign languages, adhering to the principles of academic and professional communication.</i></p>	<p>Studentul/absolventul utilizează competențele lingvistice și principiile pedagogice pentru prezentarea rezultatelor științifice de specialitate.</p> <p><i>The student/graduate utilizes linguistic skills and pedagogical principles to present specialized scientific results.</i></p>

## 7. Rezultatele învățării specifice disciplinei

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
1. Studentul/absolventul identifică, descrie și explică principalele categorii de instrumente digitale utilizate în chimie și rolul acestora în redactarea științifică, reprezentarea structurilor chimice, prelucrarea datelor, documentarea bibliografică și organizarea fluxurilor de lucru digitale.
2. Studentul/absolventul explică principiile de bază ale reprezentării digitale a informației chimice, prin raportare la formatele de fișiere, reprezentările 2D și 3D ale structurilor, tipurile de imagini și interoperabilitatea dintre aplicațiile utilizate în chimie.
3. Studentul/absolventul descrie modalitățile de organizare, prelucrare și reprezentare a datelor experimentale și bibliografice în medii digitale, utilizând concepte specifice de structurare, validare, trasabilitate și reproductibilitate.
4. Studentul/absolventul identifică și explică bunele practici și limitele utilizării instrumentelor digitale, bazelor de date și sistemelor AI în activitățile academice și profesionale din domeniul chimiei, în contexte de învățare ghidate.
Abilități academice specifice (Specific academic skills)
1. Studentul/absolventul utilizează, în contexte academice ghidate, aplicații și medii digitale specifice pentru redactarea documentelor științifice, desenul și vizualizarea structurilor chimice, conversia formatelor și organizarea resurselor bibliografice.
2. Studentul/absolventul prelucrează și reprezintă date experimentale și informații chimice folosind foi de calcul, medii de analiză și instrumente software dedicate, pentru obținerea de tabele, grafice, figuri și materiale științifice corect structurate.
3. Studentul/absolventul integrează în mod responsabil instrumente digitale, baze de date științifice și fluxuri de lucru automatizate pentru documentarea, organizarea, prezentarea și comunicarea rezultatelor în activități specifice domeniului chimiei.

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare - învățare	Observații <sup>3</sup>
1. Software utilizat în chimie: categorii de programe utilizate de chimiști; rolul fiecărui tip de software în activitatea curentă; noțiuni despre compatibilitate, interoperabilitate și alegerea software-ului potrivit.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
2. Bash, WSL și medii conda pentru lucru științific: utilizarea liniei de comandă în activități curente; WSL pentru mediu Linux pe Windows; comenzi Bash utile pentru organizarea și manipularea fișierelor; medii conda pentru instalarea și izolarea pachetelor necesare.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
3. Redactare științifică în Word / LibreOffice Writer / LaTeX: aplicarea stilurilor pentru titluri, subtitluri și corp de text; definirea și modificarea stilurilor; generarea automată a cuprinsului; utilizarea listelor numerotate; inserarea și numerotarea tabelelor și ecuațiilor; referințe încrucișate; scrierea ecuațiilor și formulelor în LaTeX.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
4. Formate de imagini și utilizarea lor: diferența dintre imagini raster și imagini vectoriale; formate uzuale pentru lucru științific; rezoluție, dimensiune, raport de aspect, transparență, alegerea formatului potrivit; bune practici în PowerPoint și LibreOffice Impress: aliniere, dimensiuni consistente, grupare, utilizarea șabloanelor, evitarea pierderii de calitate la redimensionare.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
5. Programe pentru desen chimic 2D: desenarea moleculelor, ionilor și reacțiilor; stereochemie și reprezentare corectă; realizarea de scheme și figuri chimice clare; transferul structurilor către alte aplicații.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
6. Programe pentru conversia și reprezentarea digitală a structurilor: formate de fișiere pentru reprezentarea structurilor; conversia între reprezentări; validarea unei structuri după conversie; utilizarea formatelor în fluxuri de lucru diferite.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
7. Programe pentru vizualizare moleculară 3D: generarea și vizualizarea de structuri 3D; măsurarea distanțelor, unghiurilor și unghiurilor diedre; compararea conformațiilor; utilizarea modelelor 3D pentru interpretare și comunicare.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
8. Tipuri de fișiere cu coordonate și utilizarea lor în programele chimice: rolul fișierelor cu coordonate în chimie digitală; informația conținută de diferite formate; comparație între principalele formate; alegerea formatului potrivit în funcție de context; limitări și pierderi de informație la conversii.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
9. Programe pentru management bibliografic: software specific; organizarea referințelor și a PDF-urilor; inserarea citărilor în documente; generarea automată a bibliografiei; organizarea surselor pentru lucrări, rapoarte și proiecte.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
10. Programe pentru prelucrarea datelor experimentale: organizarea datelor experimentale; curățare, filtrare și validare; formule, sortări și structuri tabelare corecte.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
11. Programe pentru realizarea graficelor și analiza datelor: structurarea datelor pentru reprezentare grafică; prelucrarea tabelară în pandas; reprezentări grafice cu matplotlib și seaborn; actualizarea și reproducerea automată a figurilor.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
12. Automatizare, managementul datelor și reproductibilitate digitală: automatizarea pașilor repetitivi; documentarea fluxurilor de lucru; organizarea fișierelor și a proiectelor; caiet electronic de laborator; gestionarea versiunilor, arhivare și trasabilitate.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
13. Baze de date și platforme științifice cu informații chimice: căutare după nume, formulă, structură și identificatori; extragerea	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră

<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.

proprietăților și a datelor asociate compușilor; căutare bibliografică relevantă.		
14. Modele AI, agenți și utilizarea lor în fluxuri de lucru pentru chimie: limitări, riscuri și bune practici în utilizarea responsabilă a sistemelor AI.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 oră
Bibliografie 1. Weiss, C. J. <i>Scientific Computing for Chemists with Python</i> , 2026. <a href="https://github.com/weisscharlesj/SciCompforChemists">https://github.com/weisscharlesj/SciCompforChemists</a> (accesat 2026-04-22). 2. The LaTeX Project. <i>LaTeX – A document preparation system</i> , 2026. <a href="https://www.latex-project.org/">https://www.latex-project.org/</a> (accesat 2026-04-22). 3. LibreOffice Documentation Team. <i>Writer Guide 24.2</i> , <a href="https://books.libreoffice.org/en/WG24/WG24.html">https://books.libreoffice.org/en/WG24/WG24.html</a> (accesat 2026-04-22). 4. RDKit. <i>The RDKit Documentation</i> , 2025. <a href="http://rdkit.org/docs/">http://rdkit.org/docs/</a> (accesat 2026-04-22). 5. Avogadro Project. <i>Guide – Avogadro 2.0.0 documentation</i> , <a href="https://avogadro.cc/docs/">https://avogadro.cc/docs/</a> (accesat 2026-04-22). 6. Open Babel Project. <i>User Guide – Open Babel documentation</i> , <a href="https://openbabel.org/docs/">https://openbabel.org/docs/</a> (accesat 2026-04-22). 7. Zotero. <i>Quick Start Guide</i> , 2024. <a href="https://www.zotero.org/support/quick_start_guide">https://www.zotero.org/support/quick_start_guide</a> (accesat 2026-04-22). 8. Conda Community. <i>Getting started with conda</i> , <a href="https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/getting-started.html">https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/getting-started.html</a> (accesat 2026-04-22). 9. Microsoft. <i>Windows Subsystem for Linux Documentation</i> , 2025. <a href="https://learn.microsoft.com/en-us/windows/wsl/">https://learn.microsoft.com/en-us/windows/wsl/</a> (accesat 2026-04-22). 10. S. Bräse. Digital chemistry: navigating the confluence of computation and experimentation – definition, status quo, and future perspective. <i>Digital Discovery</i> <b>2024</b> , 3, 1923-1932.		
<b>8.2 Seminar / laborator</b>	<b>Metode de predare - învățare</b>	<b>Observații</b>
1. Instalare, configurare și organizarea mediului digital de lucru.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
2. Bash, WSL și conda – configurarea mediului de lucru.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
3. Redactare științifică în Word / LibreOffice Writer / LaTeX.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
4. Formate de imagini și utilizarea lor în documente.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
5. Aplicații practice în programe de reprezentare 2D a moleculelor.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
6. Conversia structurilor în format digital.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
7. Vizualizare și construcția 3D a moleculelor în software dedicat.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
8. Conversia și reprezentarea digitală a structurilor.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
9. Management bibliografic în software dedicat.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
10. Prelucrarea datelor experimentale în foi de calcul.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
11. Prelucrarea și analiza datelor experimentale utilizând biblioteci Python.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
12. Automatizarea fluxurilor de lucru în Jupyter Notebook.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
13. Căutare de compuși și proprietăți în baze de date.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
14. Proiect integrator cu utilizarea combinată a programelor studiate.	Exercițiul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2 ore
Bibliografie 1. Jupyter Developers. <i>The Jupyter Notebook Documentation</i> . <a href="https://jupyter-notebook.readthedocs.io/en/stable/notebook.html">https://jupyter-notebook.readthedocs.io/en/stable/notebook.html</a> (accesat 2026-04-22). 2. Conda Community. <i>Getting started with conda</i> . <a href="https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/getting-started.html">https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/getting-started.html</a> (accesat 2026-04-22). 3. Microsoft. <i>Windows Subsystem for Linux Documentation</i> , 2025. <a href="https://learn.microsoft.com/en-us/windows/wsl/">https://learn.microsoft.com/en-us/windows/wsl/</a> (accesat 2026-04-22). 4. pandas Development Team. <i>Getting started – pandas documentation</i> . <a href="https://pandas.pydata.org/docs/getting_started/index.html">https://pandas.pydata.org/docs/getting_started/index.html</a> (accesat 2026-04-22).		






































5. Matplotlib Development Team. *Installation – Matplotlib documentation*. <https://matplotlib.org/stable/install/index.html> (accesat 2026-04-22).

6. Waskom, M. *Installing and getting started – seaborn documentation*. <https://seaborn.pydata.org/installing.html> (accesat 2026-04-22).

## 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		Noțiunile din curs sunt evaluate prin activitățile aplicative și proiectele de la laborator	
9.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la laborator.	Evaluare pe parcurs pe parcurs.	100%
9.6 Standard minim de promovare			
Nota <b>5 (cinci)</b> la toate evaluarile, conform baremului.			

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

		Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă						
								
								
								Nu se aplică nici o etichetă
								

Data completării:  
17.04.2026

Semnătura titularului de curs  
Conf. Dr. Ciprian I. Raț

Semnătura titularului de laborator  
Conf. Dr. Ciprian I. Raț

Lector Dr. Ionuț Tudor Moraru

Lector Dr. Ionuț Tudor Moraru

Data avizării în departament  
24.04.2026

Semnătura directorului de departament  
Prof. Dr. habil. ing. Monica Ioana Toșa

<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”.