

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 CLINICĂ / master in chimie
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Structura și dinamica moleculară			Codul disciplinei	CMR6238
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
Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					69 ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					15
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat (consiliere profesională)					5
Examinări					4
Alte activități					5
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	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)¹

Competențe profesionale	
Codul competenței	Competență
CP3	Utilizează echipamente de laborator, software-uri pentru sisteme de date și instrumente informatice Uses laboratory equipment, data systems software, and computer tools
CP7	Dezvolta teorii științifice Develop scientific theories
CP10	Citește, interpretează și rezumă în mod critic informații noi și complexe din diverse surse Read, interpret, and critically summarize new and complex information from various sources
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT2	Citește, interpretează și rezumă în mod critic informații noi și complexe din diverse surse Read, interpret, and critically summarize new and complex information from various sources

6.2. Rezultatele învățării specifice programului de studii (se preiau din planul de învățământ)²

Rezultatele învățării vizate prin disciplină		
Codul competenței	Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)	Abilități academice specifice (Specific academic skills)
CP3, CP7, CP10, CT2	Cunoaște tehnicile de analiză multivariată pentru interpretarea și clasificarea datelor experimentale, software-uri pentru sisteme de date și instrumente informatice Knows multivariate analysis techniques for interpreting and classifying experimental data, software for data systems and computer tools	Utilizează metode statistice moderne pentru interpretarea și clasificarea datelor experimentale, software-uri pentru sisteme de date și instrumente informatice Uses modern statistical methods for interpreting and classifying experimental data, data systems software, and computer tools

7. Rezultatele învățării specifice disciplinei

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
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.
Abilități academice specifice (Specific academic skills)
Studentul analizează și aplică concepte, teorii avansate privind modelarea moleculară a unor sisteme complexe

¹ 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.

² 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.

Studentul utilizează creativ tehnicile chimiei computazionale in proiectarea rațională a unor noi sisteme chimice
Studentul intelege si evalueaza proprietatile spectrale ale unor sisteme complexe pe baza tehnicilor de modelare moleculara

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare - învățare	Observații ³
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
8.1.10. Metode hibride QM/MM.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2h
8.1.11. Calculul proprietăților sistemelor moleculare si supramoleculare: determinarea distribuției de sarcină, potențiale moleculare electrostatice, frecvente vibrationale.	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 si 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 De exemplu aspecte organizatorice, recomandări pentru studenți, aspecte specifice legate de curs/seminar cum ar fi invitarea unor practicieni în domeniu etc.

3. I. Silaghi-Dumitrescu, D. Horvath, *Mecanica Moleculara*, Presa Universitara 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, <i>A laboratory Book of Computational Organic Chemistry</i> , Wavefunction, Irvine, California, 1996. 2. E. Lewars, <i>Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics</i> , Kluwer Academic Publishers, 2003.		

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare ⁴	9.2 Metode de evaluare ⁵	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Verificare pe parcurs onsite (VP). Se vor organiza trei evaluări pe parcurs, structurate după cum urmează: VP1 aferentă cursurilor 1–5, VP2 aferentă cursurilor 6–10, iar VP3 aferentă cursurilor 11–14. Nota finală pentru VP se va calcula ca media notelor obținute la fiecare dintre aceste evaluări. Notarea este condiționată de efectuarea activităților de laborator. Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen.	70%
	Rezolvarea corectă a problemelor		

⁴ 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.

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

		Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	
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)⁶

		Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă						
								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:

28.04.2026

Semnătura directorului de departament

Prof. Dr. Habil Monica-Ioana TOSA

⁶ 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”.

