

**FIȘA DISCIPLINEI**  
**STRUCTURĂ ȘI DINAMICĂ 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	Departamentul de Chimie și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclu de studii	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	Tehnici Moderne de Sinteze în Chimie
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

**2. Date despre disciplină**

2.1. Denumirea disciplinei	<b>Structură și dinamică moleculară</b>			Codul disciplinei	<b>CMM 6631</b>
2.2. Titularul activităților de curs	Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál				
2.3. Titularul activităților de seminar	Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál				
2.4. Anul de studiu	I	2.5. Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	Examen
2.7. Regimul disciplinei	Obligativ		2.8. Tipul disciplinei	Disciplină fundamentală (DF)	

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

3.1. Număr de ore pe săptămână	3	din care: 3.2. curs	2	3.3. seminar/ laborator/ proiect	1
3.4. Total ore din planul de învățământ	42	din care: 3.5. curs	28	3.6 seminar/laborator	14
<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)					38
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)					2
Examinări					3
Alte activități					
<b>3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)</b>				<b>83</b>	
<b>3.8. Total ore pe semestru</b>				<b>125</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	<ul style="list-style-type: none"> <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 în laborator cu masca, halat, manusi, cârpă de laborator.</li> <li>• Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune</li> <li>• Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Este interzis accesul cu mâncare în laborator</li> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise</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
CP1	Utilizarea avansată a conceptelor și principiilor fundamentale în sinteza chimică modernă
CP4	Caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari cu aplicații în industria farmaceutică și cosmetică.
CP5	Identificarea și definirea unui subiect de cercetare, elaborarea și punerea în practică a unui plan de realizare a obiectivelor propuse și valorificarea rezultatelor obținute.
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT2	Planificarea, monitorizarea și asumarea sarcinilor profesionale ale unui grup/ grupuri profesional(e) subordonate. Demonstrarea capacității de coordonare a activității, gândire analitică, adaptabilitate și flexibilitate, colaborare cu membrii echipei.
CT3	Aplică principiile eticii și integrității științifice în activitățile de cercetare

#### 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)
CP5	Cunoaște metodele avansate de analiză și caracterizare a compușilor organici și anorganici	Aplică metode și tehnici moderne de analiză și caracterizare utilizate în laboratoare de chimie.
CT2	Cunoaște procesele tehnologice de obținere a formelor farmaceutice și a preparatelor cosmetice, rolul excipienților utilizați și mecanismele de eliberare a substanțelor active.	Capacitatea de a efectua caracterizarea fizico-chimică a produselor farmaceutice și cosmetice (stabilitate, reologie, dimensiunea particulelor) și de a aplica standardele de asigurare a calității.

#### 7. Rezultatele învățării specifice disciplinei

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
1. Metode de aproximări în chimia cuantică
2. Metoda variatională.
3. Metoda perturbatională
4. Reactivitate chimică
5. Aprecierea reactivității chimice funcție de structura moleculară
6. Familiarizarea studenților cu unele metode de chimie cuantică și de elucidarea relației structură-reactivitate chimică.

<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.

Abilități academice specifice (Specific academic skills)
1.

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare - învățare	Observații <sup>3</sup>
8.1.1. Metode exacte și metode bazate pe aproximări Concepte de bază, cuvinte-cheie: Ecuația lui Schrödinger, Spinul electronului, determinantul Slater.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.2. Metoda OM a lui Huckel. Concepte de bază, cuvinte-cheie: sisteme de legături pi. Sisteme localizate, sisteme delocalizate. Exemplul etenei.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.3. Aplicații de calcul prin metoda Huckel. Concepte de bază, cuvinte-cheie: butadiena calculul coeficienților prin metoda van Fleck.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.4 Aplicații de calcul pe baza simetriei moleculare. Concepte de bază, cuvinte-cheie: benzenul, hidrocarburi alternante și h. nealternante	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.5. Sisteme delocalizate cu heteroatomi. Concepte de bază, cuvinte-cheie: piridina, aproximarea integralelor	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.6. Metoda Huckel perfecționată Concepte de bază, cuvinte-cheie: polaritatea legăturii; moment dipolar;	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.7. Metoda polarizabilităților Concepte de bază, cuvinte-cheie: ecuația Coulson.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.8. Calculul unor integrale moleculare Concepte de bază, cuvinte-cheie: integrale de acoperire pentru orbitali Slater, orbitale GTO	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.9 Evaluări semiempirice în teoria OM Concepte de bază, cuvinte-cheie: termeni monoelectronici, termeni multielectronici	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.10. Formule aproximative pentru termenii multielectronici. Concepte de bază, cuvinte-cheie: formalismul hamiltonianului mono-electronic efectiv, pastrarea invarianței.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.11 Calculul prin procedee semiempirice de OM a unor proprietăți fizico-chimice Concepte de bază, cuvinte cheie: Teorema Hellmann-Feynmann, geometria de echilibru.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12. Constante de forță din studii MO Concepte de bază, cuvinte-cheie: calduri de deformare, atomizare	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Aplicarea metodelor semiempirice de MO în studiul tranzițiilor spectrale. Concepte de bază, cuvinte cheie: intensități IR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Calculul de constante de scindare hiperfina, studiul constantelor de ecranare Concepte de bază, cuvinte-cheie: RES, RMN.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie		
1. P.W. Atkins, J. de Paula, Physical Chemistry, 7th Ed., Oxford, 2002.		
2. I. Zsákó, Chimie Fizică, EDP, București 1973		

<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.

3. J. Keeler, P. Wothers, Chemical Structure and Reactivity, Oxford University Press, 2008.
4. S. Moldoveanu, A.Savin: Aplicatii în chimie ale metodelor semiempirice de OM, Ed. Academiei Republicii Socialiste Romania 1980

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare - învățare	Observații
8.2.1. Notiuni de mecanica cuantica. Notari. Constante universale.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea;	
8.2.2. Simetrie moleculara. Determinarea grupului de simetrie a moleculelor.	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.3 Determinarea momentelor de dipol ale unor molecule. Polarizație molară; polarizație de deplasare și de orientare; moment de dipol permanent și indus; dielcometrie	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.4. valuarea teoretica a spectrelor IR Spectre de rotație; spectre de vibrație; spectre de vibrație-rotatie ale moleculelor diatomice; vibrații de valență și de deformare; benzi caracteristice; modelarea spectrelor IR	Experimentul; Explicația; Conversația;;Problematizarea	
8.2.5. Evaluarea teoretica a spectrelor UV-VIZ. Tranziții electronice, nivele electronice, orbitali moleculari, cromofori, tabelul Deslandres.	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.6. Generare teoretica de spectre de difracție Raze Roentgen, difracția prin rețele cristaline, constanta rețelei, interpretarea spectrelor	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.7. Prezentarea programului de calcul Hyperchem.	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.8. Calcule HMO pentru sisteme nedelocalizate.	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.9. Ccalcule HMO pentru isteme delocalizate.	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.10. Calcule HMO pentru sisteme cu heteroatomi.	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.11. Calcule cu metoda HMO perfectionata.	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.12. Calculul consantelor de forta prin metoda MO.	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.13. Calcule de tranzitii spectrale.	Experimentul; Explicația; Conversația;Problematizarea	
8.2.14. Verificarea cunostiintelor	Test	
Bibliografie		
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 1.) Z.Andrei, I.Zsako, L.D.Bobos, și col., "Lucrari practice de termodinamica și structura chimica", Ed. UBB, Cluj-Napoca, 1996.</li> <li>2. 2.) Arthur M.Halpern, Experimental Physical Chemistry, 2-nd ed., Prentice-Hall International, London 1997.</li> </ol>		

## 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 problematicii tratate la curs Rezolvarea corectă a problemelor	Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	80%
9.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator	Condiții de prezentare la examen: efectuarea tuturor lucrărilor de laborator; lucrările la care s-a absentat <u>motivată</u> pot fi recuperate cu altă grupă de studenți, sau o lucrare – în ultima săptămână dinaintea sesiunii. Referatele de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice – se predau în ultima săptămână de activitate didactică Colocviu laborator – test – se susține în ultima săptămână de activitate didactică	20%
9.6 Standard minim de promovare			
Nota 5 (cinci) examen conform baremului			

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

<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”.

  Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă								
1 FĂRA SĂRĂCIE	2 FOAMETE "ZERO"	3 SĂNĂTATE ȘI BUNĂSTARE	4 EDUCATIE DE CALITATE	5 EGALITATE DE GEN	6 APĂ CURATĂ ȘI SANITATIE	7 ENERGIE CURATĂ ȘI LA PREȚURI ACCESIBILE	8 MUNCĂ DECENTĂ ȘI CREȘTERE ECONOMICĂ	9 INDUSTRIE, INOVAȚIE ȘI INFRASTRUCTURĂ
								
	11 ORAȘE ȘI COMUNITĂȚI DURABILE	12 CONSUM ȘI PRODUCȚIE RESPONSABILĂ	13 ACȚIUNE CLIMATICĂ	14 VIAȚĂ ACVATICĂ	15 VIAȚĂ TERESTRĂ	16 PACE, JUSTIȚIE ȘI INSTITUȚII EFICIENTE	17 PARTENERIATE PENTRU REALIZAREA OBIECTIVELOR	Nu se aplică nici o etichetă
								X

Data completării:

20.04.2026

Semnătura titularului de curs

Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál

Semnătura titularului de seminar

Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál

Data avizării în departament:

24.04.2026

Semnătura directorului de departament

Prof.dr.ing.Paizs Csaba