

**FIȘA DISCIPLINEI**  
**ELEMENTE DE MODELARE MOLECULARĂ**

Anul universitar 2026-27

**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	Chimie
1.5. Ciclul de studii	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	Tehnici moderne de sinteză în chimie
1.7. Forma de învățământ	cu frecvență

**2. Date despre disciplină**

2.1. Denumirea disciplinei	<b>Elemente de modelare moleculară</b>			Codul disciplinei	<b>CMM6634</b>
2.2. Titularul activităților de curs	Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt KUN				
2.3. Titularul activităților de seminar	Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt KUN				
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)					30
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					10
Tutoriat (consiliere profesională)					5
Examinări					4
Alte activități					
<b>3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)</b>				<b>69</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	Cunoștințe de bază în chimie, structură moleculară

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

5.1. de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Sală prevăzută cu tablă și videoproiector.</li> <li>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Se va stimula participarea interactivă.</li> </ul>
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Completarea / predarea referatelor se face la o săptămână la laboratorul următor;</li> <li>• Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune</li> <li>• Este interzis accesul cu mâncare/băutură în laborator</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)
CP1	Cunoaște metodele avansate, teoriile și metodelor specifice chimiei și fizicii în cercetare.	Aplică metode și tehnici moderne de analiză și caracterizare utilizate în cercetare.
CP4	Înțelege modelarea și simularea proceselor chimice și fizice prin metode computaționale avansate.	Utilizează software-uri specializate și algoritmi pentru a simula procese chimice și fizice, analizând datele obținute pentru a prezice proprietățile sistemelor și a optimiza condițiile experimentale.
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.
CT3	Cunoaște conceptele de sinton, echivalent sintetic și transformări de grup funcțional (FGI) necesare pentru deconstrucția logică a moleculelor organice complexe.	Aplică deconectările strategice și analiza retrosintetică pentru a proiecta rute de sinteză eficiente, selectând precursori accesibili și optimizând stereochemia

### 7. Rezultatele învățării specifice disciplinei

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
1. Familiarizarea studenților cu noțiuni de bază și avansate, concepte, teorii și modele de bază din domeniul modelării moleculare
2. 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.

<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>Abilități academice specifice (Specific academic skills)</b>
1. Dobândirea cunoștințelor pentru dezvoltarea și utilizarea chimiei cuantice în studiul structurilor moleculare și a proceselor chimice
2. Dobândirea cunoștințelor pentru determinarea și interpretarea proprietăților structurale ale compușilor chimici cu ajutorul modelării moleculare.

## 8. Conținuturi

<b>8.1 Curs</b>	<b>Metode de predare - învățare</b>	<b>Observații<sup>3</sup></b>
1. Introducere în modelarea moleculară, definirea domeniului, relația cu celelalte ramuri ale chimiei	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Suprafețe de potențial	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Mecanica moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Bazele teoriei orbitalilor moleculari. Seturi de bază	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Metoda MO ab initio Hartree-Fock	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
6. Metode MO semiempirice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
7. Metode MO avansate, post- Hartree-Fock	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Teoria funcționalelor de densitate (DFT).	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
9. Metode hibride QM/MM	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Metode de dinamică moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Calculul proprietăților sistemelor moleculare	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Calculul proprietăților sistemelor moleculare, determinarea distribuției de sarcină, potențiale moleculare electrostatice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Calculul stărilor excitate	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Determinarea mecanismelor de reacție prin calculul stărilor de tranziție	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
<b>Bibliografie</b> 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, Mecanică Moleculară, Presa Universitară Cluj-Napoca, 1996. 4. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999. 5. Gy.Tasi Számítógépes kémia, JATEPress Szeged, 2010 6. Mueller M.R. Fundamentals of Quantum Chemistry.. Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computations Kluwer Academic Publishers, 2001		
<b>8.2 Seminar / laborator</b>	<b>Metode de predare - învățare</b>	<b>Observații</b>
1. Prezentarea lucrărilor, cerințe, mod de întocmire a referatelor. Noțiuni recapitulative.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	ședințe de o oră
2. Construirea de modele moleculare pe	Experimentul; Explicația;	

<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.

calculator. Programe utilizate.	Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul mecanicii moleculare	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor ab initio și semiempirice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Profile energetice. Analiză conformațională.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
6. Metode de analiză a funcției de undă/densității electronice.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
7. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Evaluare	test	
9. Stări de tranziție	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Construirea modelelor implicând mai mult decât o moleculă: sisteme supramoleculare, nanosisteme	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Modelarea formei și energiei sistemelor supramoleculare	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Tehnici dinamice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Evaluare pe parcurs, prezentare referat	Prezentare studiu de literatură	
Bibliografie W. J. Hehre, A. J. Shusterman, W. W. Huang, A laboratory Book of Computational Organic Chemistry, Wavefunction, Irvine, California, 1996. 2. Spartan - Tutorial and User Guide 3. referate de laborator		

## 9. Evaluare




















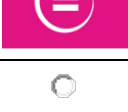


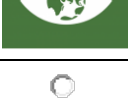





Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare <sup>4</sup>	9.2 Metode de evaluare <sup>5</sup>	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – înțelegerea și aplicarea corectă a problematicei tratate	verificare pe parcurs - test	30%
	Rezolvarea corectă a exercițiilor si problemelor.	Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen.	
9.5 Seminar/laborator	Rezolvarea corecta a temelor pe parcursul semestrului.	Notarea se face pe baza raportului scris și a datelor din fișiere anexe solicitate pentru activitățile de modelare	30%

<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.

	Rezolvarea sarcinilor practice - cercetare	Întocmirea și prezentarea unui referat pe baza calculelor proprii	40%
9.6 Standard minim de promovare			
Nota 5 (cinci) la testele de verificare conform baremului, Prezentarea problemelor de seminar și al referatului.			

## 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:

25.04.2026

Semnătura titularului de curs

Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt KUN

Semnătura titularului de seminar

Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt KUN

Data avizării în departament:

30.04.2026

Semnătura directorului de departament

**Prof. Habil. dr. ing. Paizs Csaba**

<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”.