

## FIȘA DISCIPLINEI

### *Chimie Cuantică*

Anul universitar 2026-2027

#### 1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai din Cluj-Napoca
1.2. Facultatea	Facultatea de 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 FARMACEUTICĂ - DUAL
1.7. Forma de învățământ	cu frecvență

#### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	<b>Chimie cuantică (Quantum chemistry)</b>			Codul disciplinei	<b>CLR2039</b>
2.2. Titularul activităților de curs	Lect. dr. Ionuț-Tudor Moraru				
2.3. Titularul activităților de seminar / Coordonator formațiune de studiu	Lect. dr. Ionuț-Tudor Moraru				
2.4. Anul de studiu	I	2.5. Semestrul	2	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, din care:	4	din care: 3.2. curs		3.3. seminar/ laborator/ lucrări practice	
3.1.1 Nr. de ore pe săptămână învățare-predare	2		2		
3.1.2 Nr. de ore pe săptămână învățare prin muncă	2				2
3.4. Total ore din planul de învățământ din care:	56	din care: 3.5. curs		3.6 seminar/laborator/ lucrări practice	
3.4.1 Număr total de ore de învățare-predare	28		28		
3.4.2 Număr total de ore de învățare prin muncă	28				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)					8
Examinări					3
Alte activități					-
<b>3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI) din care:</b>				71	
3.7.1 învățare-predare				51	
3.7.2 învățare prin muncă				20	
<b>3.8. Total ore pe semestru din care:</b>				125	
3.8.1 învățare-predare				60	
3.8.2 învățare prin muncă				65	
<b>3.9. Numărul de credite din care:</b>				5	
3.9.1 învățare-predare				2	
3.9.2 învățare prin muncă				3	

**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 / lucrărilor practice	Prezența la activitățile de seminar este obligatorie în condițiile stabilite prin regulament.

**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	Gestionează procedurile de analiza chimică <i>Manages chemical analysis procedures</i>
CP2	Documentează rezultatele analizelor. <i>Documents the analyses results</i>
CP3	Aplica tehnici de analiza statistică. <i>Apply statistical analysis techniques.</i>
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT1	Aplica proceduri de siguranță în laborator. <i>Apply safety procedures in the laboratory.</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)
CP1, 2, 3, CT1	Studentul/absolventul înțelege principiile chemometriei, bioelectrochimiei și a metodelor spectroscopice pentru determinarea structurii moleculare și a proprietăților compușilor cu aplicații în farmacologie. The student/graduate understands the principles of chemometrics, bioelectrochemistry, and spectroscopic methods for determining the molecular structure and properties of compounds with pharmacologic.	Studentul/absolventul colectează, organizează și prelucrează date experimentale utilizând instrumente digitale, tehnici de separare pentru analiza calitativă și cantitativă. The student/graduate collects, organizes, and processes experimental data using digital tools, separation techniques, and sample preparation methods for qualitative and quantitative analysis.

**7. Rezultatele învățării specifice disciplinei**

<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>Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)</b>
Studentul/absolventul utilizează corect teoriile și principiile fundamentale ale chimiei în context didactic și în laborator. <i>The student/graduate correctly uses fundamental theories and principles of chemistry in teaching and laboratory contexts.</i>
<b>Abilități academice specifice (Specific academic skills)</b>
Studentul analizează și evaluează corect noțiuni fundamentale de structura chimică și chimie cuantică și aplică teoriile și conceptele fundamentale pentru redarea și interpretarea caracteristicilor structurale și electronice ale sistemelor chimice și biochimice. <i>The student analyzes and evaluates fundamental concepts of chemical structure and quantum chemistry, and applies fundamental theories and concepts to describe and interpret the structural and electronic characteristics of chemical and biochemical systems.</i>
Studentul rezolvă probleme de structura chimică complexă utilizând metode/teorii/concepte teoretice (computationale) interdisciplinare. <i>The student solves complex chemical structure problems using interdisciplinary theoretical (computational) methods, theories, and concepts.</i>

## 8. Conținuturi

<b>8.1 Curs</b>	<b>Metode de predare - învățare</b>	<b>Observații<sup>3</sup></b>
<b>8.1.1.</b> Introducere. Noțiuni generale. Modele atomice. <b>8.1.2.</b> Ecuația lui Schrödinger pentru atomi hidrogenoizi. Orbitali atomici hidrogenoizi. Spinul electronic. <b>8.1.3.</b> Metode de aproximație în chimia cuantică. Atomi polielectronici. Orbitali atomici. <b>8.1.4.</b> Structura moleculei. Aproximația Born-Oppenheimer. Molecule diatomice și poliatomice. Teoria legăturii de valență (TLV). Hibridizare. <b>8.1.5.</b> Teoria orbitalilor moleculari. Concepte generale. Diagrame de orbitali moleculari pentru molecule homo- și heterodinucleare și sisteme complexe de tipul $AX_n$ ( $n \geq 2$ ). <b>8.1.6.</b> Seturi de bază. Concepte generale. Metoda Hückel – principii fundamentale și aplicații asupra sistemelor $\pi$ -conjugate. <b>8.1.7.</b> Metode ab-initio. Principii fundamentale. Teoria Hartree-Fock (HF). Metode post-HF. Corelația electronică. <b>8.1.8.</b> Calcule semipempirice. Metoda DFT. <b>8.1.9.</b> Calculul proprietăților sistemelor moleculare I. Optimizarea geometriei. Studiul izomerilor. Suprafețe de energie potențială. <b>8.1.10.</b> Calculul proprietăților sistemelor moleculare II. Aplicații în spectroscopia vibrațională. Calculul ZPVE și a funcțiilor termodinamice de stare. <b>8.1.11.</b> Calculul stărilor de tranziție. Aplicații în studiul mecanismelor de reacție.	Descrierea,f Explicația, Conversația, Problematizarea.	Cursul este organizat în ședințe săptămânale de 2 ore.

<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.

8.1.12. Calculul stărilor excitate. Metoda TD-DFT. Aplicații în spectroscopia de absorbție UV-Vis.		
8.1.13. Introducere în mecanica moleculară (MM). Metode hibride QM/MM. Aplicații în studiul sistemelor biochimice.		
8.1.14. Docking molecular. Aplicații în chimia farmaceutică.		
Bibliografie: 1. D. D. Fitts, „PRINCIPLES OF QUANTUM MECHANICS as Applied to Chemistry and Chemical Physics”, Cambridge University Press, 1999. 2. P. W. Atkins, R.S. Friedman, „Molecular Quantum Mechanics”, Oxford University Press, USA; 5 edition, 2010. 3. I. N. Levine, „Quantum Chemistry”, Prentice Hall, 7th Edition, 2013. 4. C. J. Cramer, „Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models”, Wiley, 2004. 5. E. Lewars, „Computational Chemistry, Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics”, Kluwer Academic Publishers, 2003.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare - învățare	Observații
Bibliografie		
8.3 Lucrări practice/laborator/învățare prin muncă (desfășurate la OE)	Metode de predare - învățare	Observații
8.1.1. Introducere. Noțiuni generale. Modele atomice.	Descrierea,f Explicația, Conversația, Problematizarea	Activitățile practice sunt organizate în ședințe săptămânale de 2 ore.
8.1.2. Ecuația lui Schrödinger pentru atomi hidrogenoizi. Orbitali atomici hidrogenoizi. Spinul electronic.		
8.1.3. Metode de aproximație în chimia cuantică. Atomi polielectronici. Orbitali atomici.		
8.1.4. Structura moleculei. Aproximația Born-Oppenheimer. Molecule diatomice și poliatomice. Teoria legăturii de valență (TLV). Hibridizare.		
8.1.5. Teoria orbitalilor moleculari. Concepte generale. Diagrame de orbitali moleculari pentru molecule homo- și heterodinucleare și sisteme complexe de tipul AX <sub>n</sub> (n ≥ 2).		
8.1.6. Seturi de bază. Concepte generale. Metoda Hückel – principii fundamentale și aplicații asupra sistemelor π-conjugate.		
8.1.7. Metode ab-initio. Principii fundamentale. Teoria Hartree-Fock (HF). Metode post-HF. Corelația electronică.		
8.1.8. Calcule semipempirice. Metoda DFT.		
8.1.9. Calculul proprietăților sistemelor moleculare I. Optimizarea geometriei. Studiul izomerilor. Suprafețe de energie potențială.		
8.1.10. Calculul proprietăților sistemelor moleculare II. Aplicații în spectroscopia vibrațională. Calculul ZPVE și a funcțiilor termodinamice de stare.		
8.1.11. Calculul stărilor de tranziție. Aplicații în studiul mecanismelor de reacție.		

<b>8.1.12.</b> Calculul stărilor excitate. Metoda TD-DFT. Aplicații în spectroscopia de absorbție UV-Vis.		
<b>8.1.13.</b> Introduce în mecanica moleculară (MM). Metode hibride QM/MM. Aplicații în studiul sistemelor biochimice.		
<b>8.1.14.</b> Docking molecular. Aplicații în chimia farmaceutică.		
Bibliografie		

## 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	50 %
	Rezolvarea corectă a problemelor	Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen.  Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	
9.5 Seminar/laborator/lucrări practice	-	-	-
10.5.1 învățare-predare	Nu este cazul	Nu este cazul	
10.5.2 învățare prin muncă	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei; calitatea referatelor pregătite	Test practic, notarea referatelor	50 %
9.6 Standard minim de promovare			
<p>O parte a activităților de învățare-predare (curs, respectiv seminar/laborator) se pot desfășura exclusiv în format online sincron, conform reglementărilor naționale și ale universității/facultății, respectiv în funcție de decizia titularului de disciplină, aceste aspecte fiind aduse la cunoștința studenților în primele două săptămâni de la începerea semestrului. Pentru promovarea disciplinei, este obligatorie prezența la minimum 90% dintre seminare/laboratoare, față în față, în spațiul campusului universitar, respectiv la minimum 90% din lucrările practice aferente învățării prin muncă desfășurate la operatorul economic.</p> <p>Evaluarea pentru activitățile de învățare prin muncă (pct. 10.5.2) este realizată de către cadrul didactic coordonator cu participarea tutorelui desemnat de OE. Pentru promovarea disciplinei este obligatorie susținerea probei de evaluare în sesiunea de examene.</p>			

<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.

## 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:

21.04.2026

Semnătura titularului de curs

Lect. Dr. Ionut Tudor Moraru

Semnătura titularului de seminar /

Coordonator formațiune de studiu

Lect. Dr. Ionut Tudor Moraru

..

Semnătură tutore operator economic

Data avizării în departament:

28.04.2026

Semnătura directorului de departament

Habil Prof. dr. Ing. Monica Ioana Toșa

<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”.