

## FIȘA DISCIPLINEI

### Aspecte moleculare în procese chimice

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 și Inginerie Chimică al liniei Maghiare
1.4. Domeniul de studii	Inginerie chimică
1.5. Ciclu de studii	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	Chimia și ingineria nano- și biomaterialelor
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

#### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	<b>Aspecte moleculare în procese chimice</b>			Codul disciplinei	<b>CMM8247</b>
2.2. Titularul activităților de curs	Lector dr. Nagy Levente Csaba				
2.3. Titularul activităților de seminar	Lector dr. Nagy Levente Csaba				
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	Examen
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>69 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)					6
Examinări					3
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	• Nu este cazul

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

5.1. de desfășurare a cursului	Sală cu proiector multimedia și ecran de proiecție, sau tablă interactivă. Studentii se prezintă la curs cu telefoanele mobile pe modul silențios
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	Sală cu proiector multimedia și ecran de proiecție, sau tablă interactivă. Laborator dotat cu calculatoare și software specific. Nu se permite întârzierea.

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

<b>Competențe profesionale</b>	
<b>Codul competenței</b>	<b>Competență</b>
<b>CP1</b>	Competențe de cunoaștere, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor avansate din domeniul chimiei și ingineriei nano- și biomaterialelor.
<b>CP2</b>	Capacitatea de a proiecta experimente și procese de obținere a nano- și biomaterialelor folosind instrumente asistate de calculator și ținând cont de aspectele dezvoltării durabile.
<b>CP5</b>	Identificarea, definirea și realizarea unor teme de cercetare în domeniul ingineriei de bio- și nanomateriale.
<b>Competențe transversale</b>	
<b>Codul competenței</b>	<b>Competență</b>
<b>CT1</b>	Abilitatea de a lucra autonom pentru elaborarea, programarea și implementarea cu inițiativă proprie a acțiunilor din planurile de cercetare dezvoltate.
<b>CT2</b>	Capacitatea de a conduce sau participa la echipe de cercetare internaționale în cadrul proiectelor de cercetare sau de transfer a rezultatelor cercetării către industrie sau societate.

**6.2. Rezultatele învățării specifice programului de studii (se preiau din planul de învățământ)<sup>2</sup>**

<b>Rezultatele învățării vizate prin disciplină</b>		
<b>Codul competenței</b>	<b>Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)</b>	<b>Abilități academice specifice (Specific academic skills)</b>
<b>CP2</b>	1. Realizarea unor tehnologii de obținere a bio- și nanomaterialelor, bazată pe instrumente CAD, precum și caracterizarea acestora.	1. Elaborarea proiectelor integrate, bazate pe instrumente CAD, pentru dezvoltarea creativă a tehnologiilor pentru bio- și nanomateriale.
<b>CT2</b>	2. Cunoașterea conceptelor, teoriilor specifice managementului resurselor și a calității pentru ingineria de proceselor bio- și nanotehnologice, în contextul dezvoltării durabile.	2. Utilizarea metodelor calitative și cantitative de evaluare a factorilor de risc, siguranță în operare și de management, pentru elaborarea proiectelor noi de management a resurselor și calității.

**7. Rezultatele învățării specifice disciplinei**

<b>Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)</b>
1. Studentul deține cunoștințe aprofundate privind bazele teoretice ale modelării moleculare, inclusiv principiile mecanicii moleculare și ale metodelor de chimie cuantică (ab initio, Hartree-Fock, DFT).
2. Studentul înțelege conceptul de suprafață de energie potențială și rolul acesteia în analiza conformațională și în interpretarea stabilității moleculelor.
3. Studentul cunoaște fundamentele teoriei orbitalilor moleculari, importanța seturilor de bază, precum și domeniul de aplicabilitate și limitările diferitelor aproximații din chimia cuantică.
4. Studentul înțelege principiile descrierii stărilor electronice excitate și metodologia determinării mecanismelor de reacție prin metode computaționale (stări de tranziție, coordonate de reacție).
5. Studentul cunoaște bazele modelării biomoleculare, inclusiv modelarea structurii proteinelor prin omologie, interacțiunile proteină-ligand, precum și fundamentele teoretice ale metodelor QSAR/QSPR.
<b>Abilități academice specifice (Specific academic skills)</b>
1. Studentul este capabil să utilizeze programe de modelare moleculară pentru vizualizarea, editarea și analiza cantitativă a structurilor moleculare.

<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.

2. Studentul este capabil să selecteze și să aplice metode computaționale adecvate (mecanică moleculară, ab initio, DFT, metode semiempirice) pentru rezolvarea problemelor chimice specifice.
3. Studentul este capabil să exploreze suprafețe de energie potențială, să efectueze analize conformaționale și să identifice structuri stabile și stări de tranziție.
4. Studentul este capabil să modeleze mecanisme de reacție, inclusiv optimizarea stărilor de tranziție și determinarea traseelor de reacție prin calcule de chimie cuantică.
5. Studentul este capabil să investigheze sisteme biomoleculare, inclusiv modelarea proteinelor prin omologie, realizarea studiilor de andocare moleculară proteină-ligand, precum și aplicarea și interpretarea modelelor QSAR/QSPR.

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare - învățare	Observații <sup>3</sup>
8.1.1 Prezentarea disciplinei, cunoștințelor și abilităților dobândite, cerințelor pentru promovare. Introducere în modelarea moleculară.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.2 Interacțiuni de legătură (legături, unghiuri, unghiuri diedre). Mecanica moleculară	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.3 Suprafața de energie potențială. Analiza conformațională.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.4 Introducere în grafică moleculară. Programe pentru vizualizarea, editarea și analiza structurilor moleculelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.5 Bazele teoriei orbitalilor moleculari. Seturi de bază.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.6 Metode MO ab initio și Hartree-Fock.		
8.1.7 Metode MO semiempirice.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.8 Teoria funcționalelor de densitate (DFT).	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.9 Stări electronice excitate.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.10 Metoda hibridă mecanică cuantică și mecanică moleculară QM/MM.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.11 Modelarea structurii proteinelor pe baza de omologie. Alinierea proteinelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.12 Determinarea mecanismelor de reacție prin calculul stărilor de tranziție.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.13 Metode QSAR/QSPR. 3D-QSAR.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.1.14 Interacțiuni proteină-ligand. Andocare moleculară.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Problematizarea	
<b>Bibliografie</b> 1. Nagy, L.C. Suport de curs. 2. Tasi Gy.; Számítógépes kémia. JATEPress Szeged, 2010. 3. Höltzl T., Veszprémi T.; Kémiai szimulációk az atomoktól a vegyipari reaktorokig. Akadémiai kiadó, 2019. 4. Cramer C. J.; Essentials of computational chemistry, theories and models. Wiley, 2004. 5. Lewars E.; 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

<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.

8.2.1 Prezentarea programelor utilizate. Formate de fișiere pentru modele moleculare.	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
8.2.2 Construirea de modele moleculare pe calculator.	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
3. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul mecanicii moleculare	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
4. Modelarea formei moleculare și a energiei cu ajutorul tehnicilor ab initio și semiempirice	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
5-6. Modelarea de proprietăți moleculare complexe detectabile la nivel macroscopic	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
7-8. Construirea modelelor implicând mai mult decât o moleculă; sisteme supramoleculare, nanosisteme	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
9-10. Modelarea reactivității chimice la nivel molecular și supramolecular	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
11-12. Modelarea formei și energiei sistemelor supramoleculare și a nanosistemelor.	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
13. Tehnici dinamice	Experimentul; Explicația; Conversația; Problematizarea	
14. Evaluare	Test	
<b>Bibliografie</b> 1. Foresman J.B., Frisch A.; Exploring chemistry with electronic structure methods. 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015. 2. Hehre W. J., Shusterman A. J., Huang W. W.; A laboratory book of computational organic chemistry, Wavefunction, Irvine, California, 1996. 3. Hinchliffe A.; Molecular modelling for beginners. Wiley, 2008.		

## 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 la curs	Examen oral - prezentarea referatului pe o temă din tematica disciplinei.	50%
	Rezolvarea corectă a exercițiilor si problemelor.		
9.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar. Rezolvarea corecta a temelor pe parcursul semestrului.	Temele de seminar se predau la datele stabilite.	50%
	Rezolvarea sarcinilor practice		
9.6 Standard minim de promovare			
Nota 5 (cinci) la examen conform baremului.			

<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:

20.04.2026

Semnătura titularului de curs

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Semnătura titularului de seminar

Lect. dr. NAGY Levente Csaba

Data avizării în departament:

25.04.2026

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”.